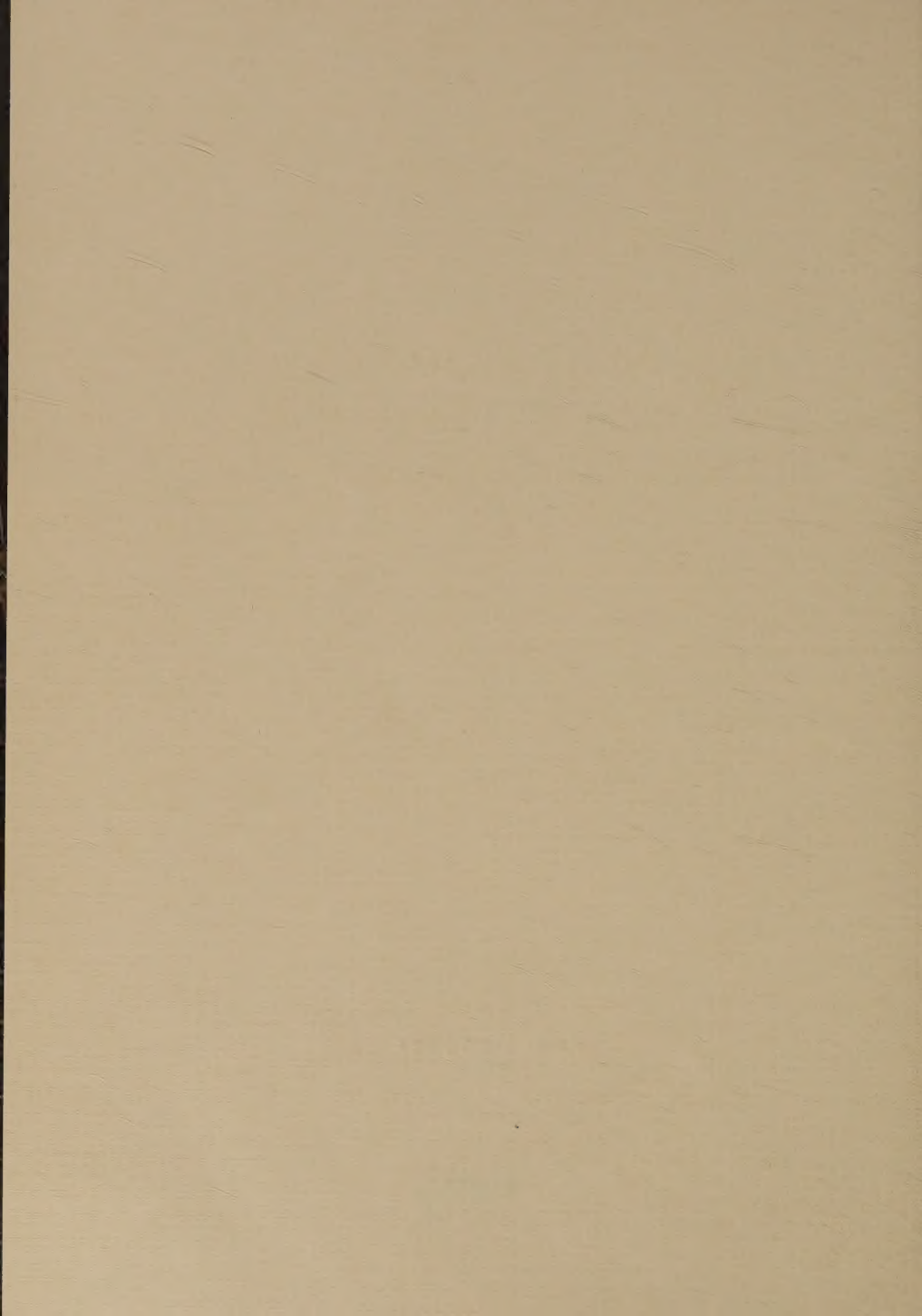


Infrarot- und Ultravioletspektren der Wirkstoffe von Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln

von
Peter Doepner
aus
Berlin

1973

1974 № 88





Aus dem Institut für Rechtsmedizin
der Universität Erlangen-Nürnberg
em. Direktor: Professor Dr. Dr. E. Weinig

Infrarot- und Ultraviolettsppektren der Wirkstoffe von Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln

Inaugural - Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
der Hohen Medizinischen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg



vorgelegt
von
Peter Doepner
aus
Berlin

Aus dem Institut für Rechtsmedizin
der Universität Erlangen-Nürnberg
am Direktor: Professor Dr. Dr. E. Weinig

Gedruckt mit Erlaubnis der Medizinischen Fakultät der
Universität Erlangen-Nürnberg

Infrarot- und Ultraviolettsparten
der Wirkstoffe von Pflanzenschutz- und
Schädlingsbekämpfungsmitteln

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
der Medizinischen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität
Erlangen-Nürnberg



verlegt

Dekan: Prof. Dr. L. Demling

Referent: Prof. Dr. Dr. E. Weinig

Tag der mündlichen Prüfung: 2. August 1973

Gewidmet meinen lieben Eltern

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
A) EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG	5
B) EXPERIMENTELLER TEIL	7
I. Einteilung der Wirkstoffe	7
II. Anfertigung der Infrarot- und Ultraviolettspektren	12
a) Infrarotspektren	12
b) Ultraviolettspektren	12
III. Infrarot- und Ultraviolett- spektren nach Wirkstoffgruppen	14
1. Chlorierte Kohlenwasserstoffe	14
2. Organische Phosphorverbindungen	26
3. Insektizide und akarazide Carbamate	40
4. Dinitro-Verbindungen	44
5. Cumarinderivate	46
6. Indandionderivate	50
7. Thioharnstoffderivate	50
8. Pyrimidinderivate	52
9. Thiurame und Thiocarbamate	54
10. Nitrobenzole	60
11. Chlorierte Carbonsäuren	62
12. Herbizide Carbamate	70
13. Herbizide Harnstoffverbindungen	74
14. Triazine	78
15. Sonstige Stoffe	82

- IV. Zusammenstellung der drei stärksten IR-Banden, der UV-Maxima und der UV-Minima nach Wirkstoffgruppen
 - V. Auffindung eines IR-Spektrums anhand der stärksten Banden
 - a) Anleitung
 - b) Verzeichnis der stärksten IR-Banden mit steigender Frequenz
 - VI. Auffindung eines UV-Spektrums anhand des stärksten Maximums
 - a) Anleitung
 - b) Verzeichnis der UV-Maxima mit steigender Wellenlänge
 - VII. Alphabetisches Verzeichnis international gebräuchlicher Namen und Handelsnamen der untersuchten Wirkstoffe
- C) DISKUSSION
- D) ZUSAMMENFASSUNG
- E) LITERATURVERZEICHNIS

A EINLEITUNG UND PROBLEMSTELLUNG

Auf dem Gebiete der forensischen und klinischen Toxikologie ist eine ständige Zunahme von Publikationen festzustellen. Auch viele Veröffentlichungen anderer Disziplinen müssen hierbei Berücksichtigung finden, so z.B. aus der reinen anorganischen, organischen und physikalisch-chemischen Analyse, der Lebensmittelchemie, der klinischen Chemie.

Es kann deshalb heute keinen Zweifel mehr darüber geben, daß nur die Dokumentation mit modernsten technischen Hilfsmitteln Abhilfe in der "Informationskrise" bringen kann.

Auch hat sich in den letzten Jahren die Erkenntnis durchgesetzt, daß ein Institut allein nicht in der Lage ist, die umfangreichen Daten, wie sie z.B. bei der Auffindung eines Giftstoffes erforderlich sind, in brauchbarer und zweckmäßiger Form zu dokumentieren.

So hat SCHMIDT (1969) auf die Notwendigkeit zur Vereinheitlichung der Datenverarbeitung aufmerksam gemacht. POST (1969) wies auf die Zweckmäßigkeit der Errichtung einer zentralen Dokumentationsstelle hin.

Bevor jedoch die Erfassung der vielfältigen, in der forensischen und klinischen Toxikologie notwendigen Daten erfolgen kann, muß eine Einigung über die verwendeten Schlüssel erfolgen.

Brauchbare Vorschläge zur Dokumentation der Literatur liegen von MÜLLER (1966) vor. POST (1969) hat zur Substanzidentifizierung die Merkmale der Substanzen auf Sichtlochkarten verschlüsselt. Die Ultraviolettpektren toxikologisch wichtiger Arzneimittel nahm PETSCHLER (1971) auf Randlochkarten auf.

Ein weiteres wichtiges Nahziel in der forensischen und klinischen Toxikologie ist die maschinengerechte Erfassung von Vergiftungserscheinungen und Autopsiebefunden. Vorschläge liegen von MACHATA (1968) und KUNZ (1968) vor.

Die Aufgabe dieser Arbeit war es, die Infrarot- und Ultraviolett-spektren von Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln unter Standardbedingungen aufzunehmen. Die erhaltenen Spektren sollten so ausgewertet werden, daß eine Substanz zunächst durch Tabellen und später mit Datenverarbeitungsmaschinen über das Infrarot- bzw. Ultraviolett-spektrum identifiziert bzw. charakterisiert werden kann. In der Literatur finden sich Infrarotspektren von Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln nur vereinzelt. Auch konnten die sechsundsiebzig Infrarotspektren von GORE et al (1971) nicht verwertet werden, da in der Arbeit Zahlenangaben über die Lage der Infrarotbanden bzw. Lage der Ultraviolettmaxima in den Ultraviolett-spektren fehlten.

B EXPERIMENTELLER TEIL

I. Einteilung der Wirkstoffe

Die dreiundneunzig untersuchten Wirkstoffe von Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln wurden in Anlehnung an KLIMMER (1964) in fünfzehn Gruppen eingeteilt:

1. Chlorierte Kohlenwasserstoffe

- 1.1 DDT
- 1.2 Methoxychlor
- 1.3 Hexachlorcyclohexan
- 1.4 Lindane
- 1.5 Aldrin
- 1.6 Dieldrin
- 1.7 Endrin
- 1.8 Chlordan
- 1.9 Heptachlor
- 1.10 Toxaphen
- 1.11 Chlorfenson
- 1.12 D-D
- 1.13 Endosulfan
- 1.14 Hexachlorbenzol
- 1.15 Tetradifon
- 1.16 Tetrasul

2. Organische Phosphorverbindungen

- 2.1 Chlorthion
- 2.2 Demeton-S-Methyl
- 2.3 Diazinon
- 2.4 Dichlorphos
- 2.5 Dimefox
- 2.6 Dimethoate
- 2.7 Disulfoton
- 2.8 Endothion
- 2.9 Fenthion

- 2.10 Folithion
- 2.11 Gusathion-A
- 2.12 Gusathion-M
- 2.13 Malathion
- 2.14 Parathion
- 2.15 Parathion-methyl
- 2.16 Phenkapton
- 2.17 Sulfotepp
- 2.18 Trichlorphon

3. Insektizide und akarazide Carbamate

- 3.1 Carbaryl
- 3.2 Dimetan
- 3.3 Dimetilan
- 3.4 Mercaptodimethur
- 3.5 Propoxur

4. Dinitro-Verbindungen

- 4.1 Binapacryl
- 4.2 Dinoseb
- 4.3 DNOC

5. Cumarinderivate

- 5.1 Coumachlor
- 5.2 Coumatetralyl
- 5.3 Warfarin

6. Indandionderivate

- 6.1 Pindone

7. Thioharnstoffderivate

7.1 ANTU

8. Pyrimidinderivate

8.1 Crimidine

9. Thiurame und Thiocarbamate

9.1 Ferbam

9.2 Maneb

9.3 Metham

9.4 Metiram

9.5 Thiram

9.6 Zineb

9.7 Ziram

10. Nitrobenzole

10.1 Quintozen

10.2 Rhondandinitrobenzol

10.3 Trichlortrinitrobenzol

11. Chlorierte Carbonsäuren

11.1 2,4-D

11.2 Dalapon-Na

11.3 Dichlorprop

11.4 Fenoprop

11.5 MCPA

11.6 MCPB

11.7 Mecoprop

11.8 2,4,5-T

11.9 TCA

12. Herbizide Carbamate

- 12.1 Chlorbufam
- 12.2 Chlorpropham
- 12.3 Diallate
- 12.4 Propham
- 12.5 Triallate

13. Herbizide Harnstoffverbindungen

- 13.1 Cycluron
- 13.2 Diuron
- 13.3 Linuron
- 13.4 Monolinuron

14. Triazine

- 14.1 Atrazin
- 14.2 Prometryn
- 14.3 Propazin
- 14.4 Simazin

15. Sonstige Stoffe

- 15.1 Allylalkohol
- 15.2 Aminotriazol
- 15.3 Captan
- 15.4 Chinothionat
- 15.5 Dazomet
- 15.6 Deiquat
- 15.7 Dithianon
- 15.8 Dodine
- 15.9 Methylisothiocyanat

- 15.10 Nikotin
- 15.11 Pentachlorphenol
- 15.12 Pyrethrum
- 15.13 Rotenon

II. Anfertigung der Infrarot- und Ultraviolettspektren

a) Infrarotspektren

Die IR-Spektren der Wirkstoffe wurden mit einem Infrarot-Spektrophotometer Modell IR - 8 der Firma Beckman im Bereich von 4000 bis 600 cm^{-1} aufgenommen. Für feste bzw. kristalline Substanzen wurde die Kaliumbromid-Pressstechnik verwendet. Die flüssigen oder öligen Wirkstoffe wurden als Chloroformlösungen untersucht.

Zur Herstellung der Kaliumbromid-Presslinge wurden je 300 mg Kaliumbromid und etwa 1 mg Substanz im Achatmörser fein verrieben und im Presswerkzeug der Firma Weber ein Pressling geformt.

Die drei intensivsten Banden auf jedem Spektrum im Bereich von 2000 bis 600 cm^{-1} wurden nach dem System von CLARKE (1969), einer Abwandlung des Vorschlages von CURRY (1963), mit A, B, C beschriftet. Hierbei wurde mit A der stärkste, mit B der zweitstärkste und mit C der drittstärkste Peak markiert. Wiesen mehrere Peaks die gleiche oder annähernd die gleiche Intensität auf, wurden sie demselben Buchstaben zugeordnet. Für die Auffindung eines Spektrums ist es ohne Bedeutung, ob der Untersucher zwei annähernd gleichgroße Peaks mit B oder mit B und C beschriftet hat.

b) Ultraviolettspektren

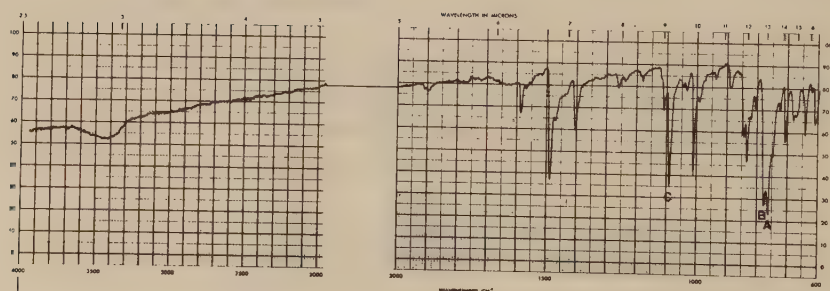
Die UV-Spektren der Wirkstoffe wurden in methanolischer Lösung mit einem selbstregistrierenden Spektralphotometer Modell DK 2 der Firma Beckman im Bereich

von 360 bis 220 nm aufgenommen. Die Konzentration einer Substanz in Methanol wurde so gewählt, daß Absorptionen im genannten Bereich festgestellt werden konnten. In einigen Fällen wurden verschiedene Verdünnungen hergestellt um auch schwächere Absorptionen aufzuzeichnen.

Die gemessenen Maxima und Minima wurden auf den Spektren eingetragen.

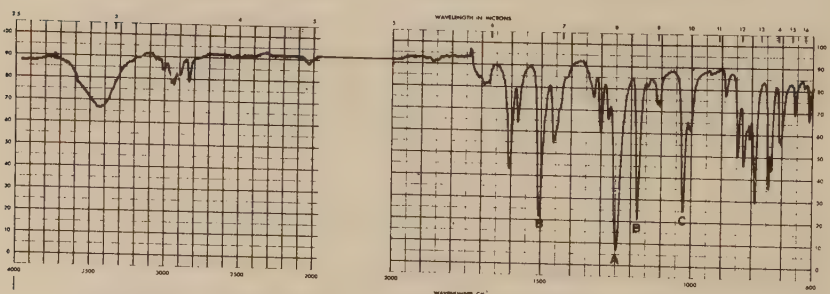
III. Infrarot- und Ultraviolettpektren nach Wirkstoffgruppen

1. CHLORIERTE KOHLENWASSERSTOFFE



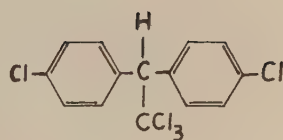
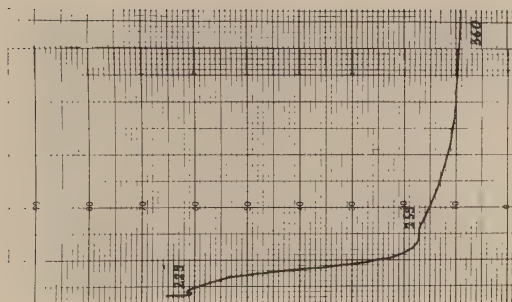
1.1 DDT

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

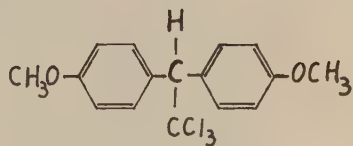
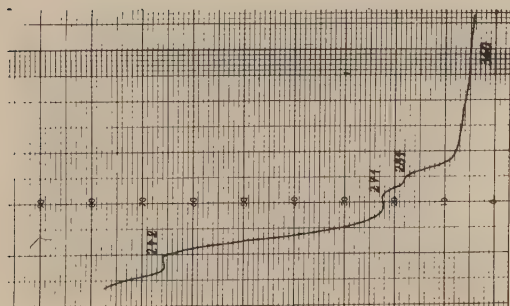


1.2 Methoxychlor

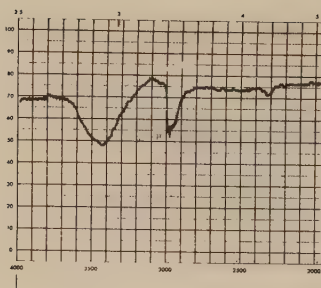
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



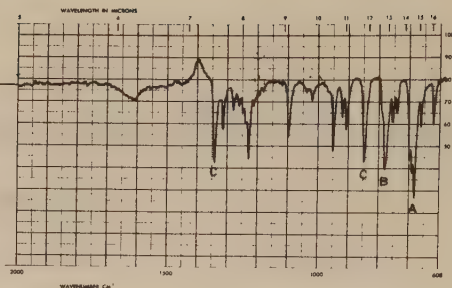
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



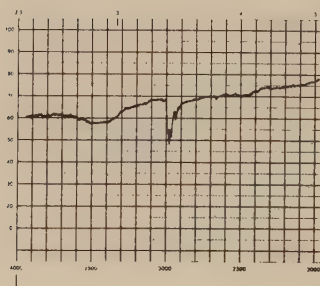
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



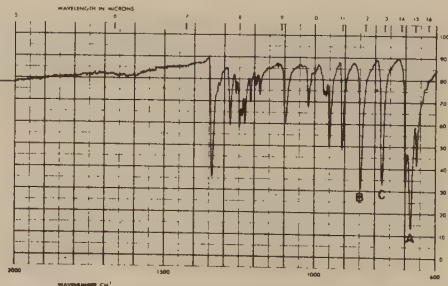
1.3 Hexachlorcyclohexan



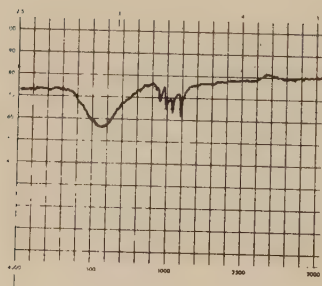
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



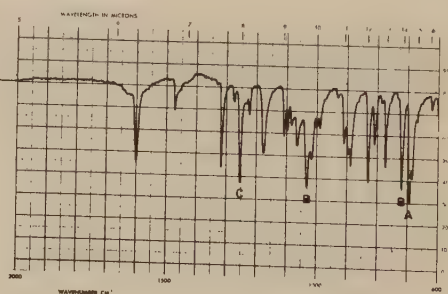
1.4 Lindane



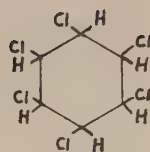
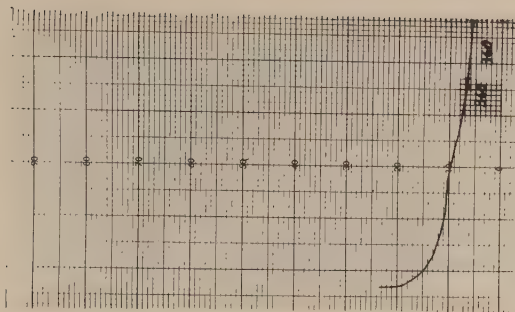
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



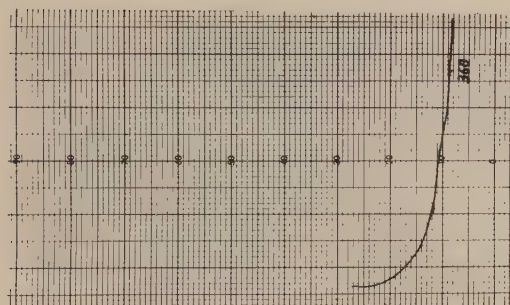
1.5 Aldrin



IR-Spektrum (KBr-Pressling)

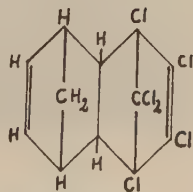
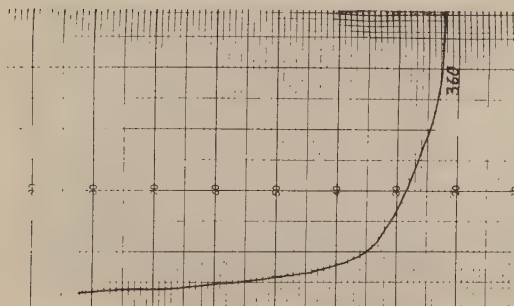


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

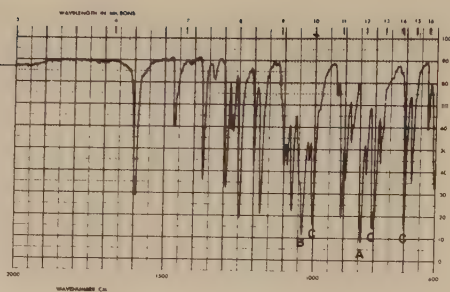
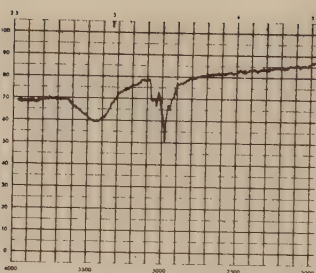


γ -Isomeres des Hexachlor-
cyclohexans

UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

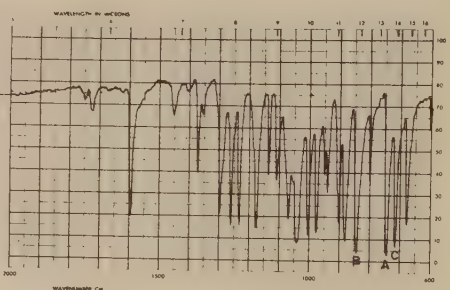
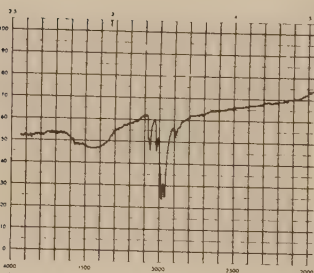


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



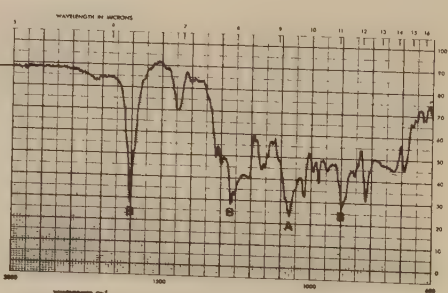
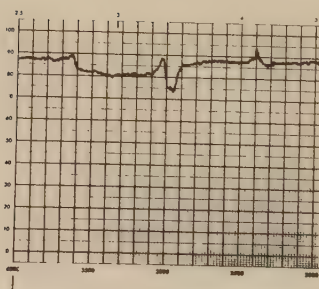
1.6 Dieldrin

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



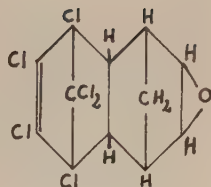
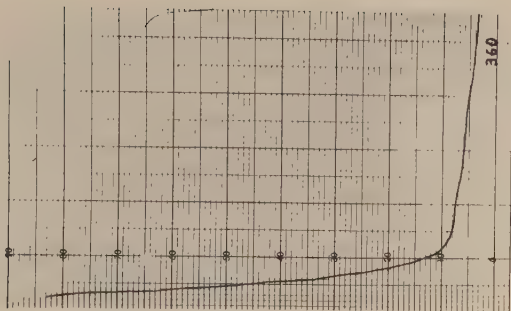
1.7 Endrin

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

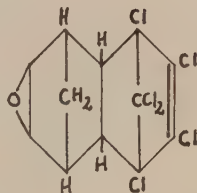
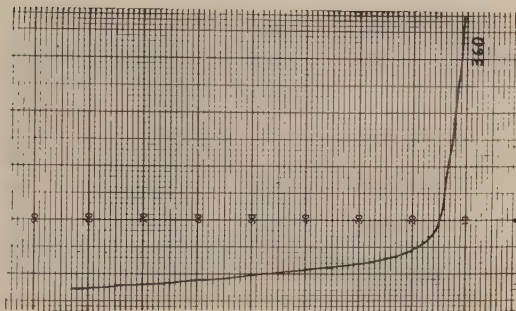


1.8 Chlordan

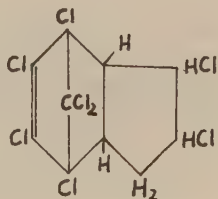
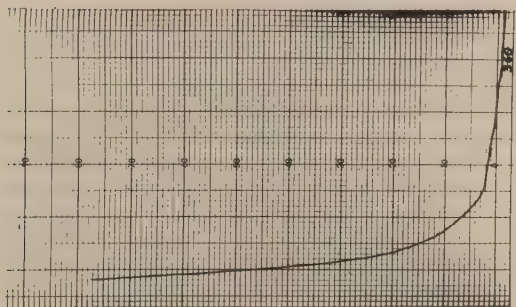
IR-Spektrum (in CHCl₃ gelöst)



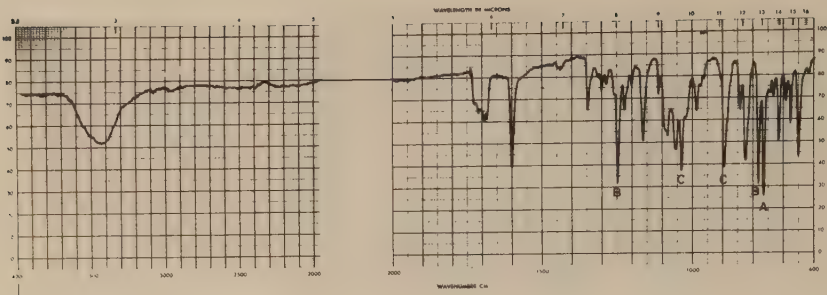
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

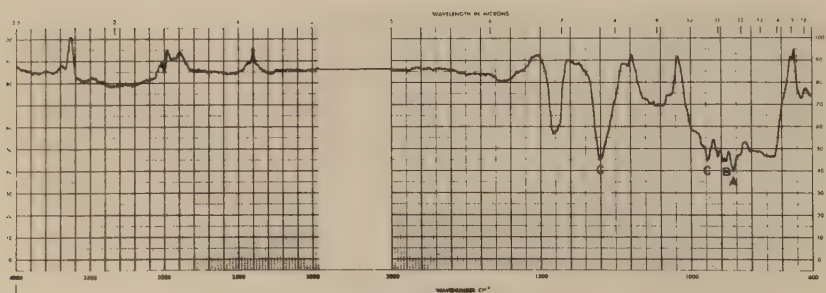


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



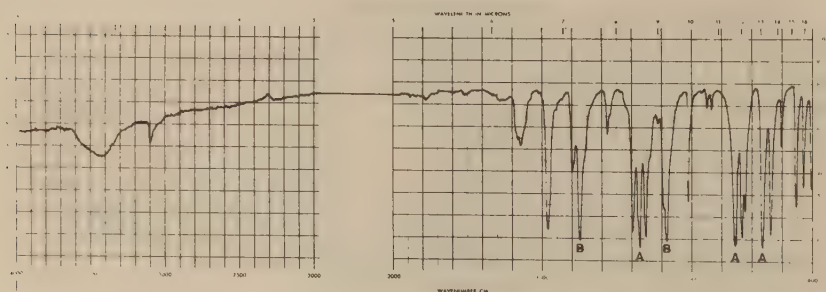
1.9 Heptachlor

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



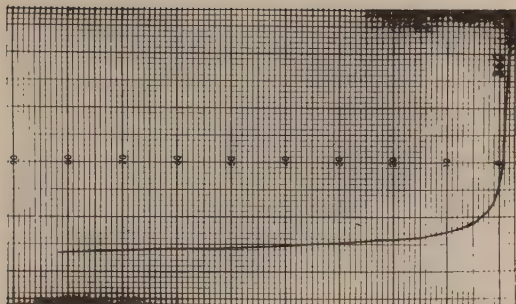
1.10 Toxaphen

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

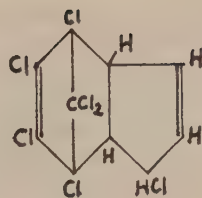


1.11 Chlorfenson

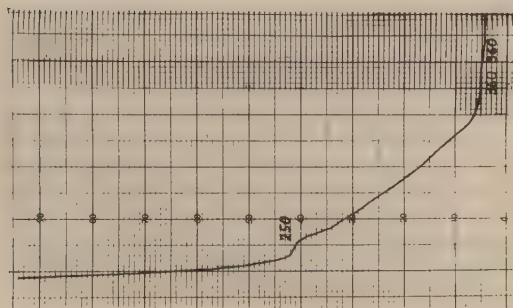
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



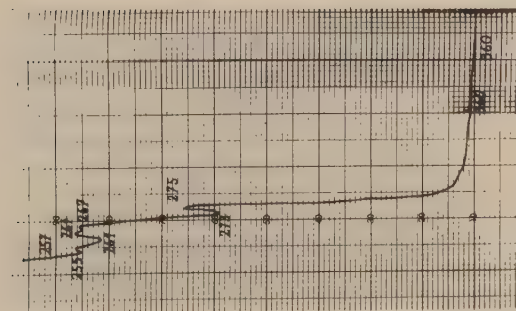
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



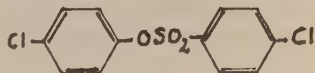
Chloriertes Camphen
(Chlorophen, Octachlorophen)

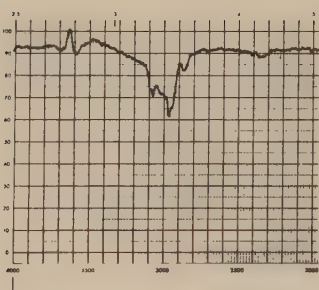


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

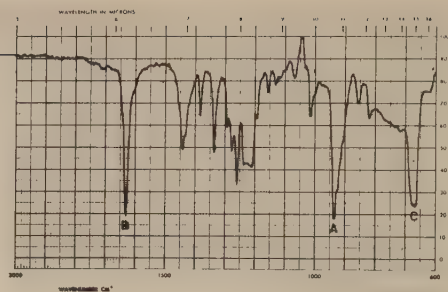


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

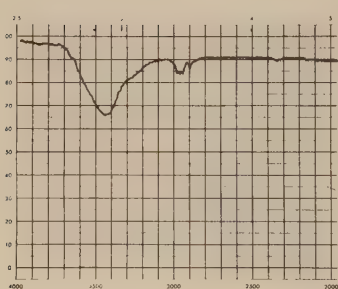




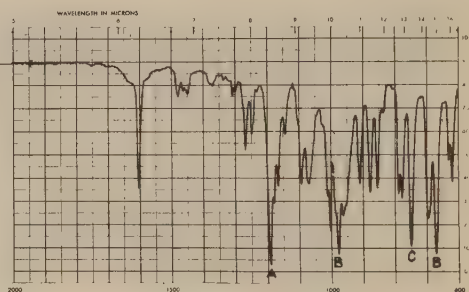
1.12 D-D



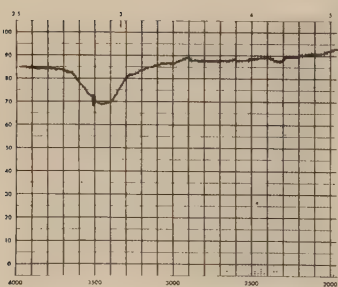
IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



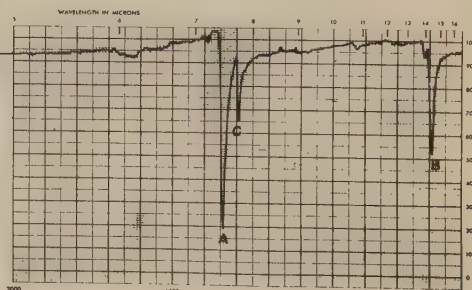
1.13 Endosulfan



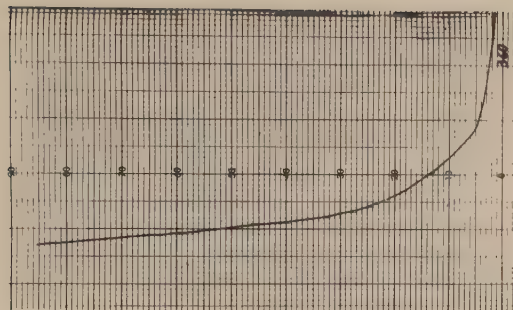
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



1.14 Hexachlorbenzol

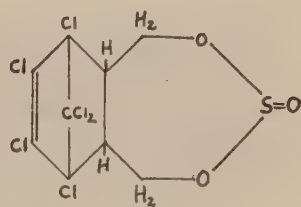
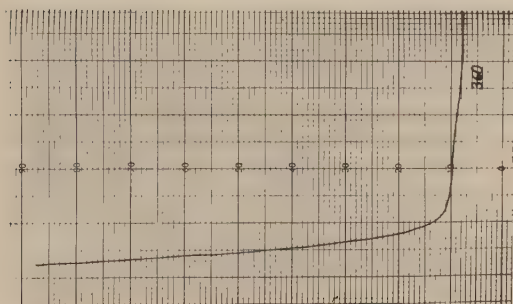


IR-Spektrum (KBr-Pressling)

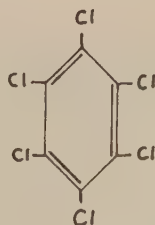
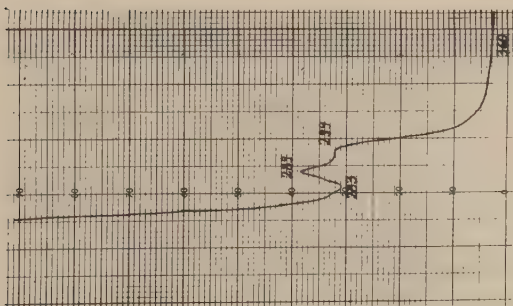


Dichloropropan-Dichlorpropen

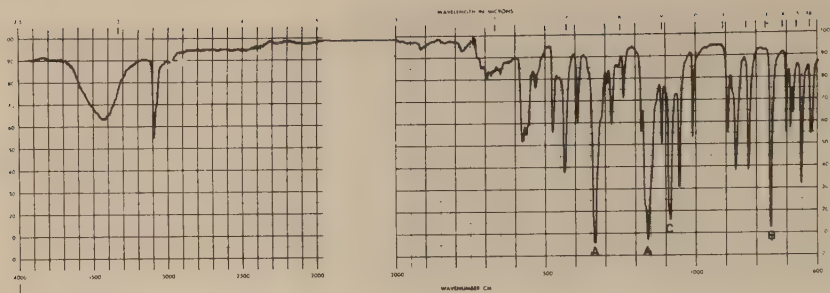
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

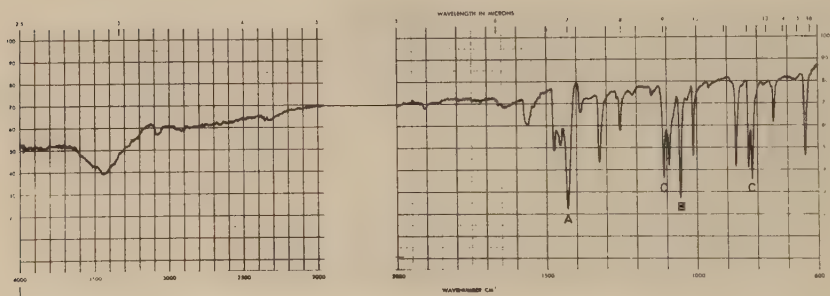


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



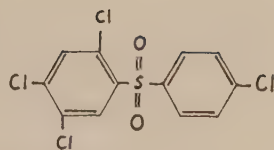
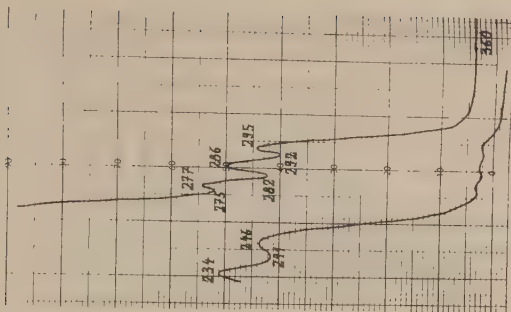
1.15 Tetradifon

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

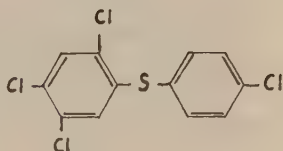
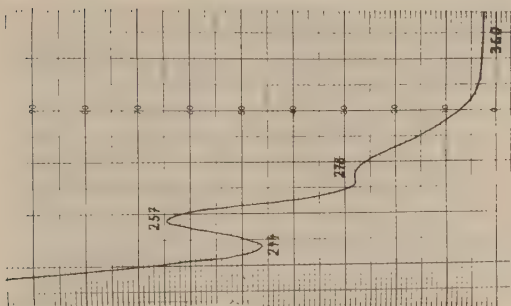


1.16 Tetrasul

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

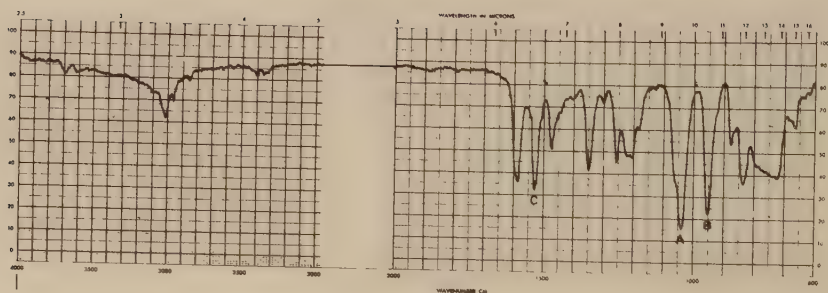


UV-Spektrum (in CH₃OH gelöst)



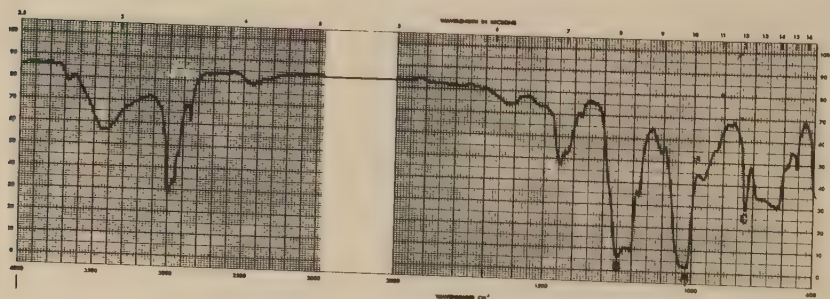
UV-Spektrum (in CH₃OH gelöst)

2. ORGANISCHE PHOSPHORVERBINDUNGEN



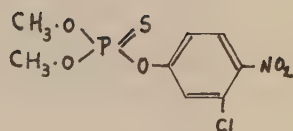
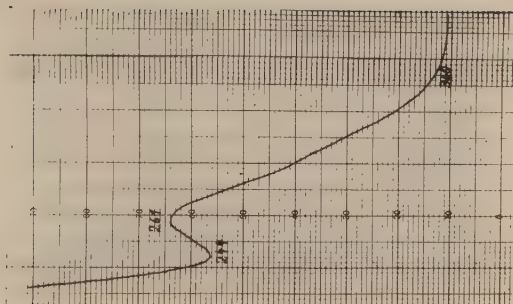
2.1 Chlorthion

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

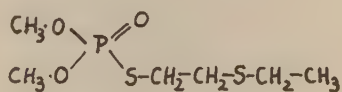
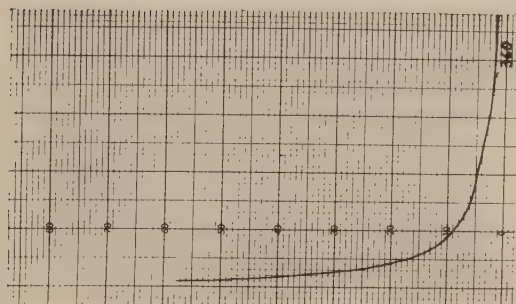


2.2 Demeton-S-Methyl

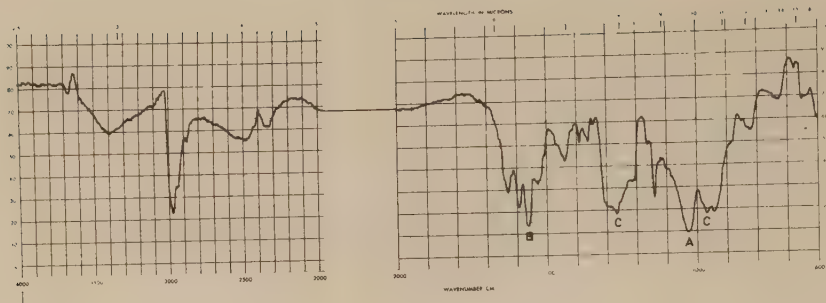
IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

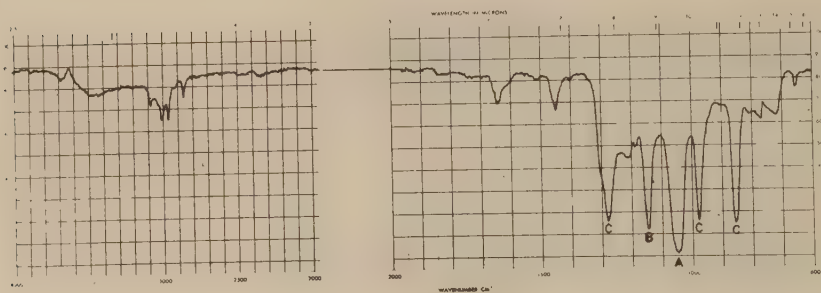


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



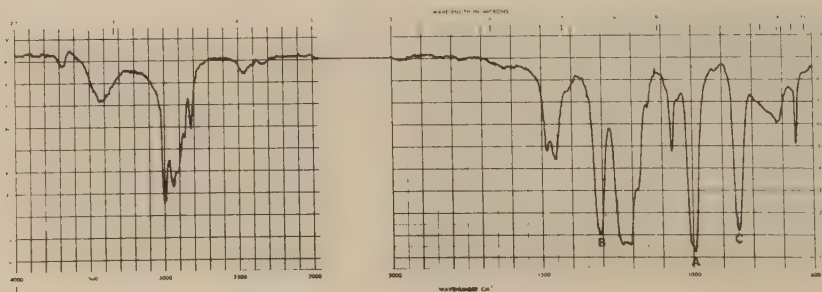
2.3 Diazinon

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



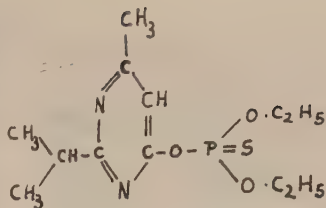
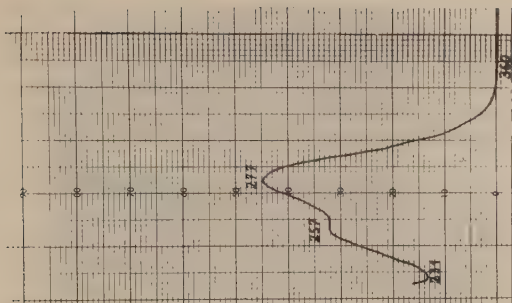
2.4 Dichlorphos

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

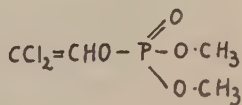
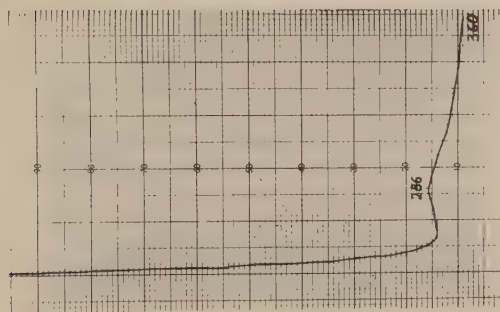


2.5 Dimefox

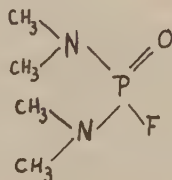
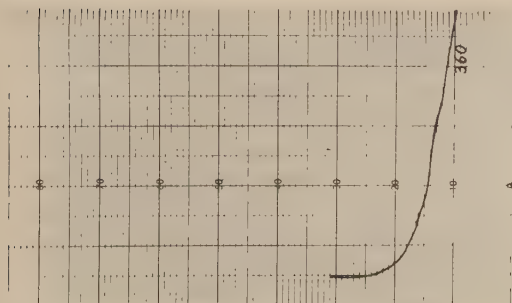
IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



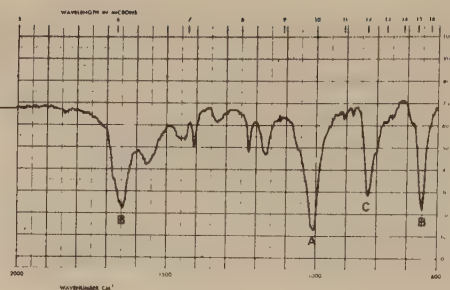
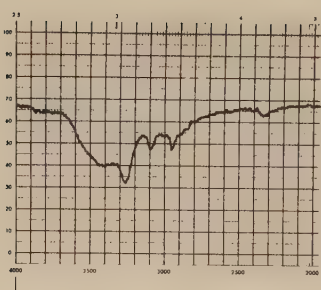
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

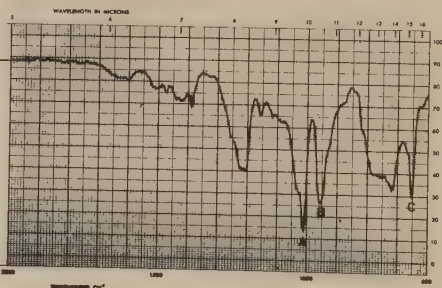
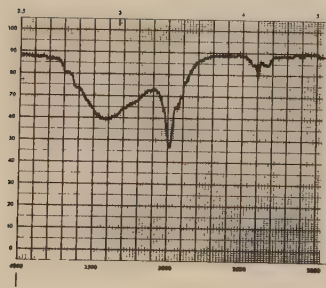


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



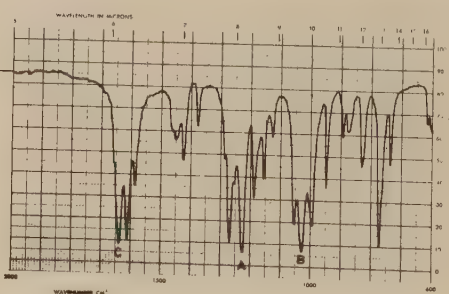
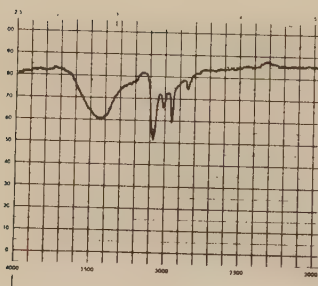
2.6 Dimethoate

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



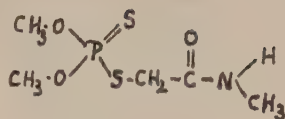
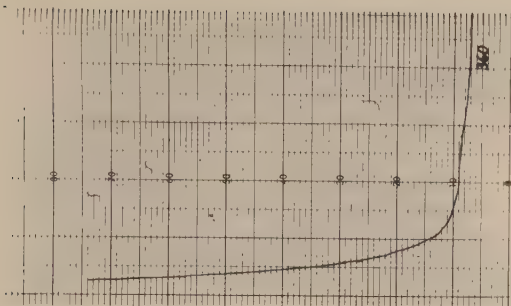
2.7 Disulfoton

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

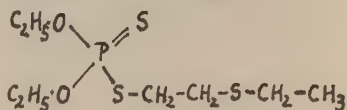
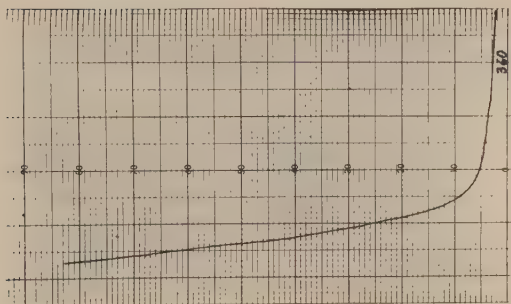


2.8 Endothion

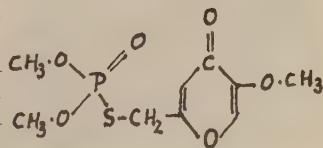
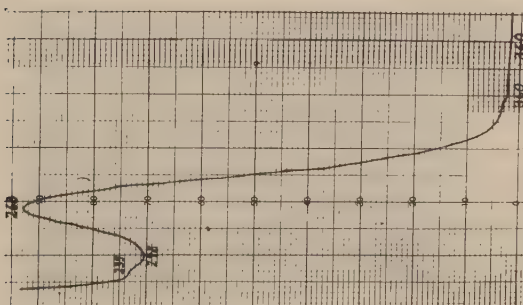
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



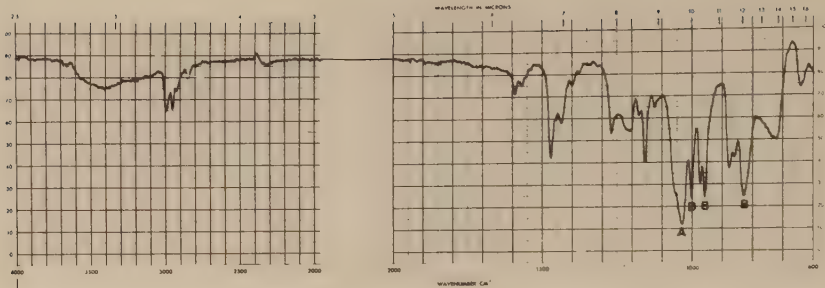
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

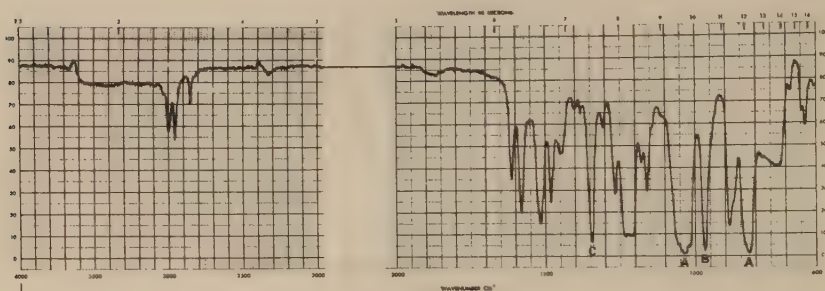


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



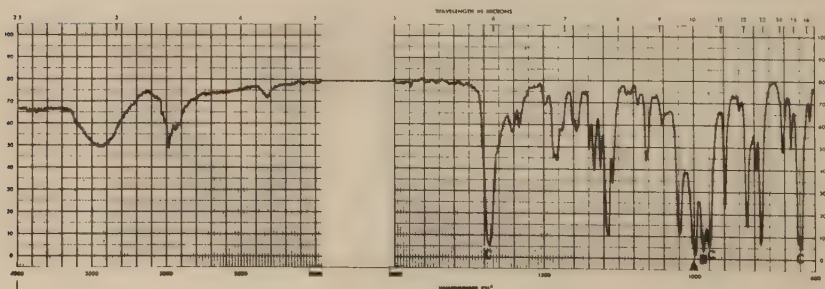
2.9 Fenthion

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



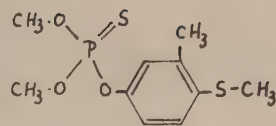
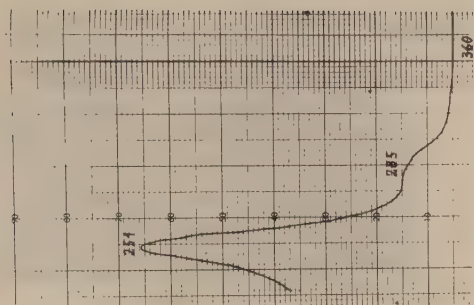
2.10 Polithion

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

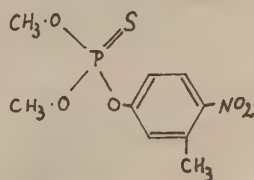
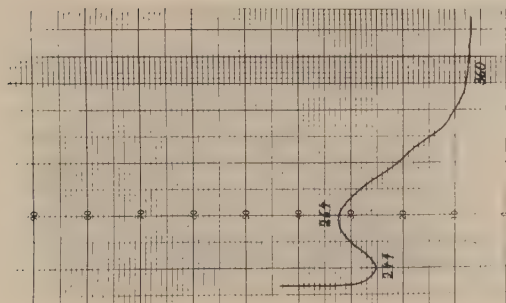


2.11 Gusathion-A

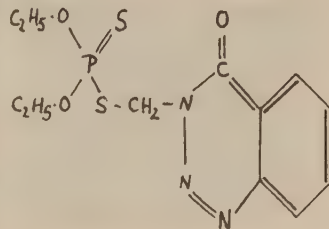
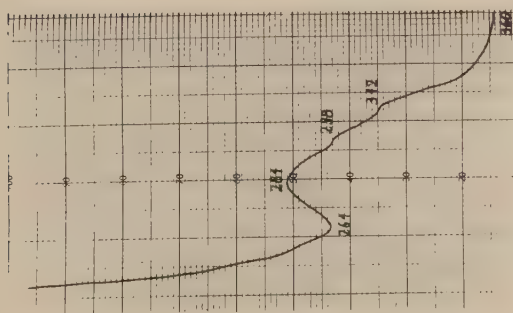
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



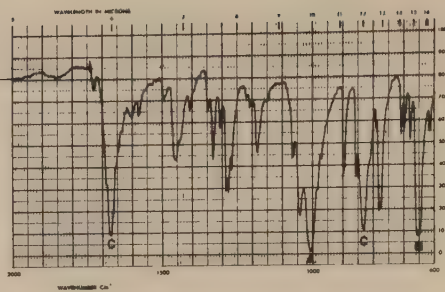
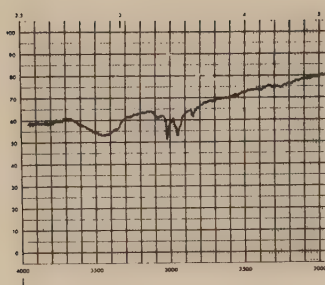
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

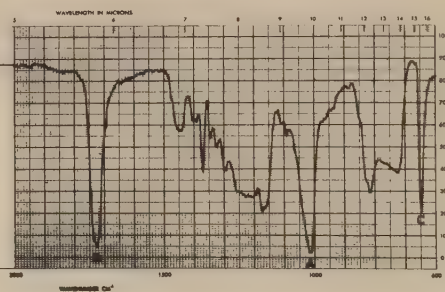
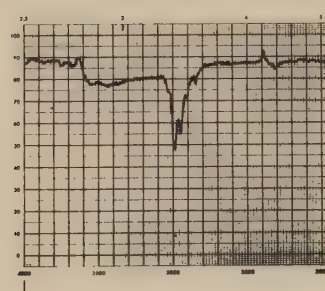


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



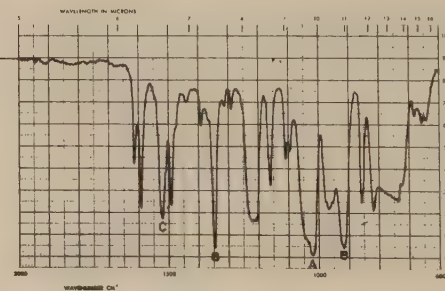
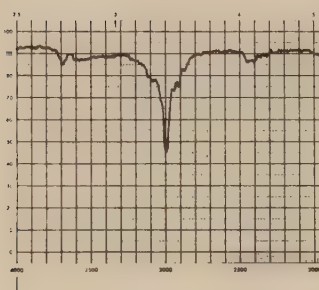
2.12 Gusathion-M

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



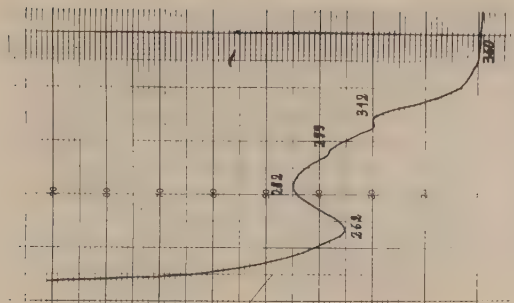
2.13 Malathion

IR-Spektrum (in CHCl₃ gelöst)

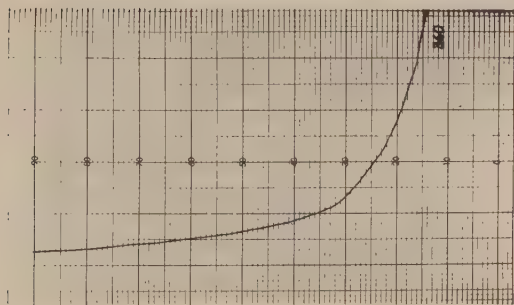
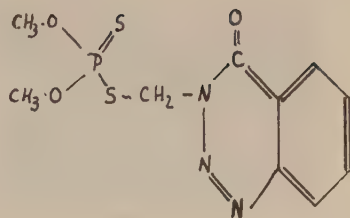


2.14 Parathion

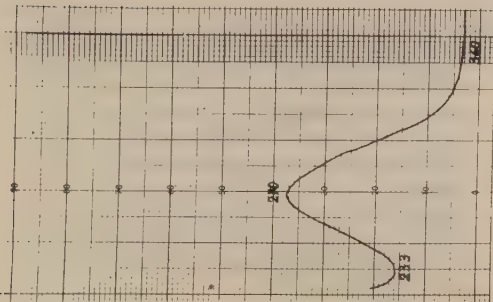
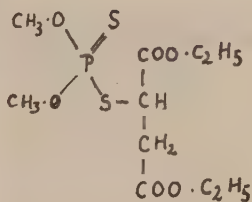
IR-Spektrum (in CHCl₃ gelöst)



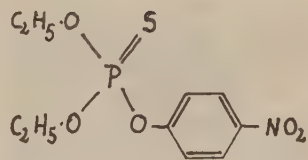
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

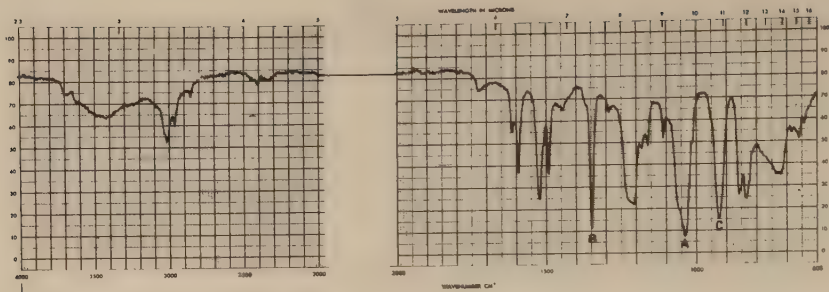


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



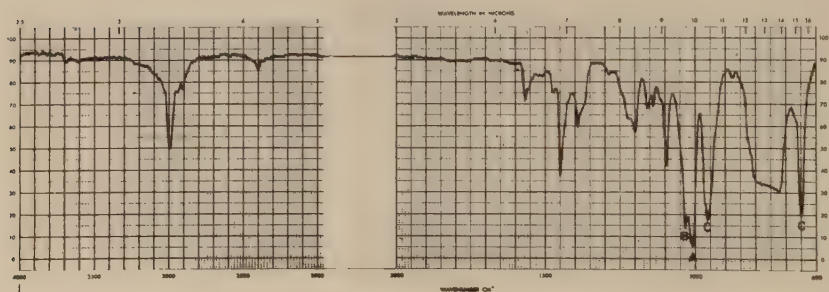
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





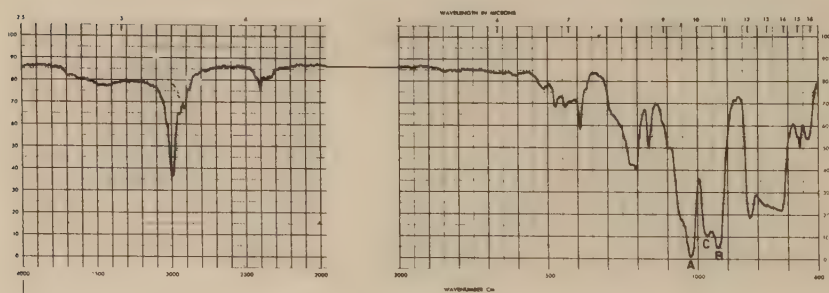
2.15 Parathion-Methyl

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



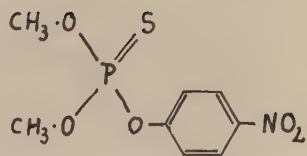
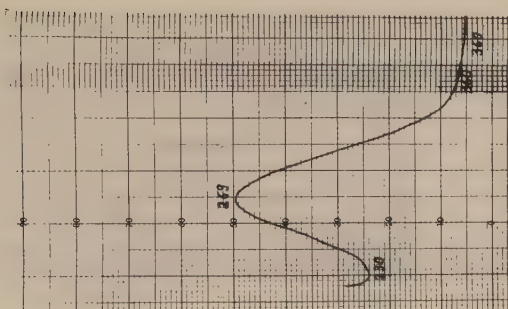
2.16 Phenkapton

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

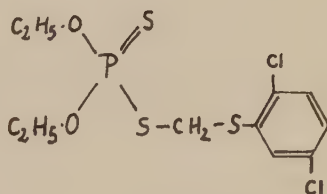
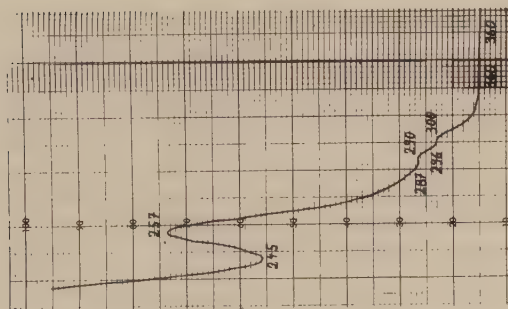


2.17 Sulfotepp

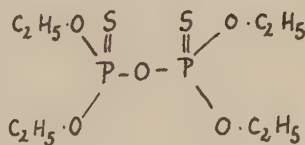
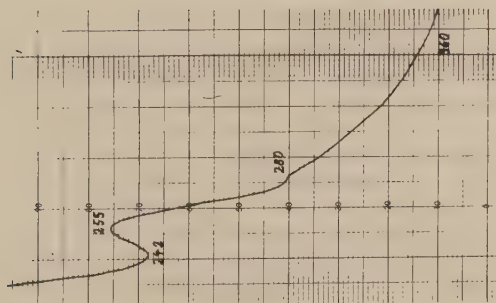
IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



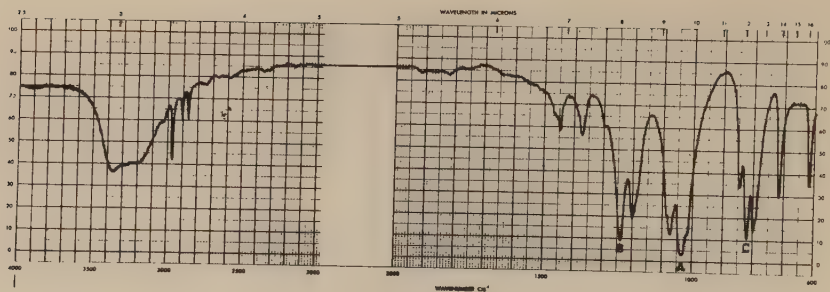
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

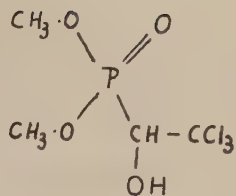
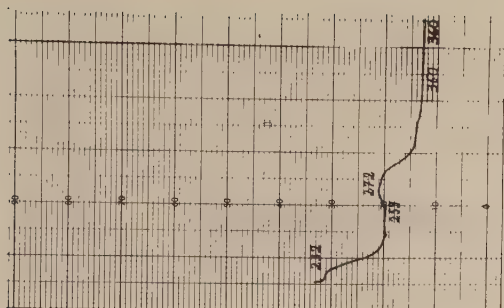


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



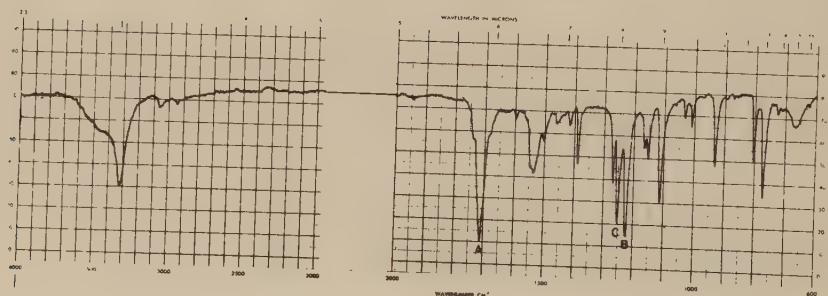
2.18 Trichlorophon

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



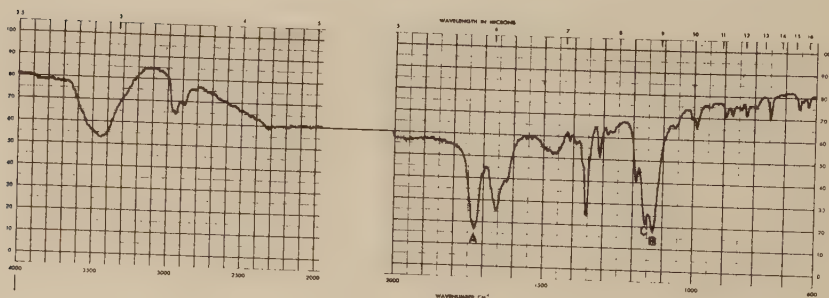
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

3. INSEKTIZIDE und AKARAZIDE CARBAMATE



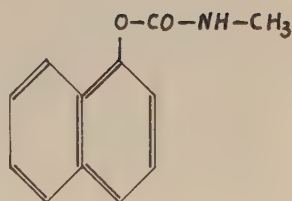
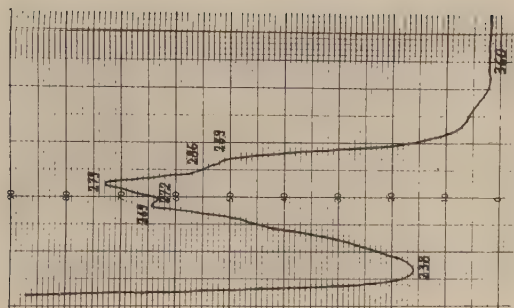
3.1 Carbaryl

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

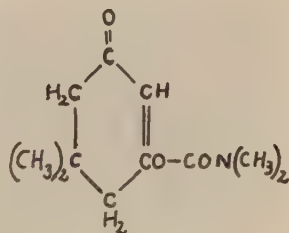
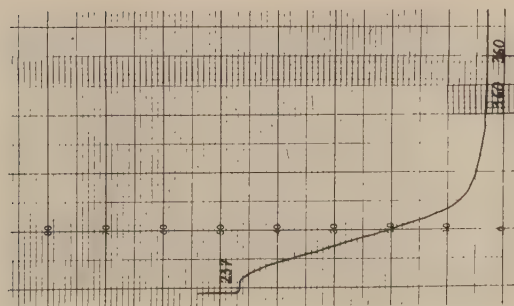


3.2 Dimetan

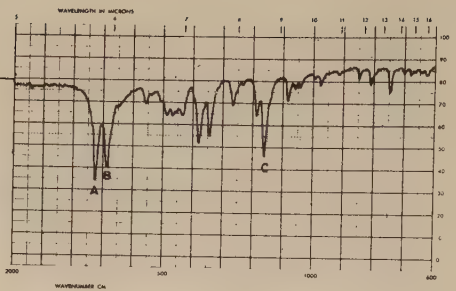
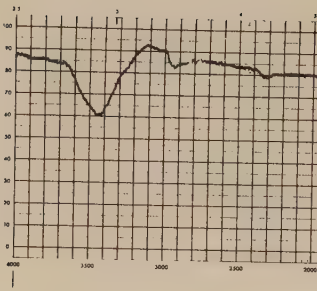
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

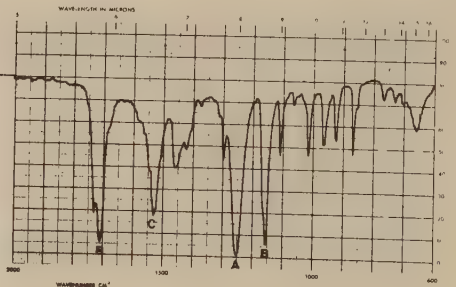
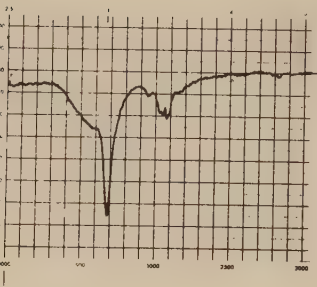


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



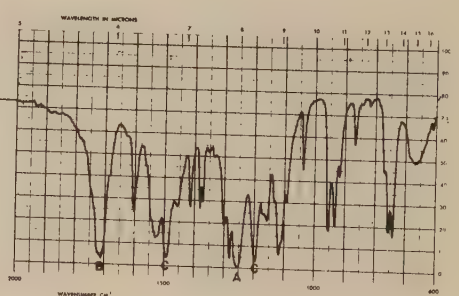
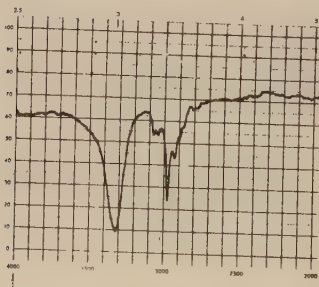
3.3 Dimetilan

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



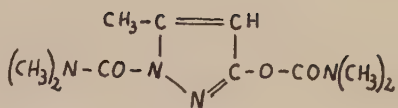
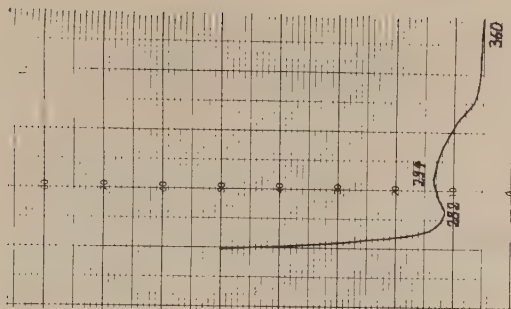
3.4 Mercaptodimethur

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

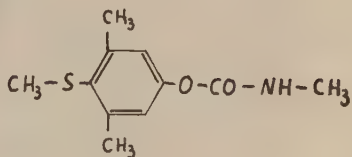
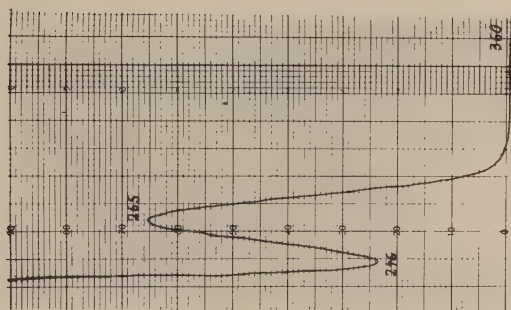


3.5 Propoxur

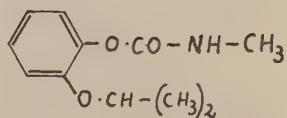
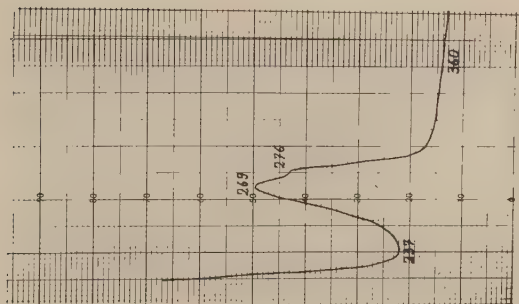
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

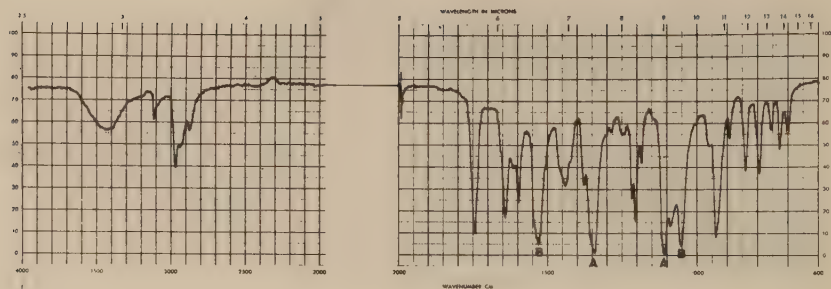


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



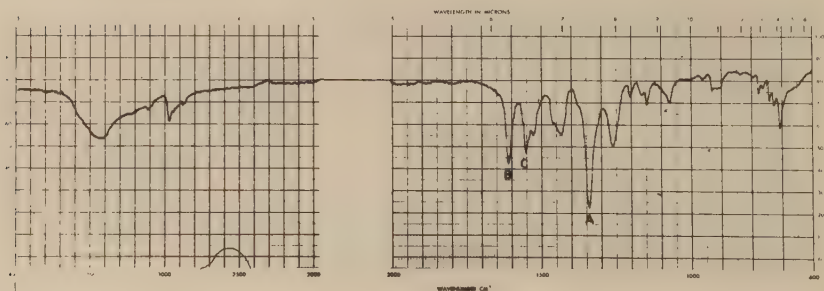
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

4. DINITRO-VERBINDUNGEN



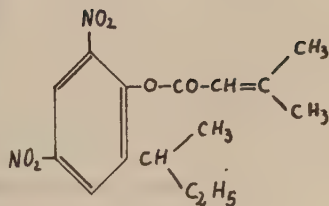
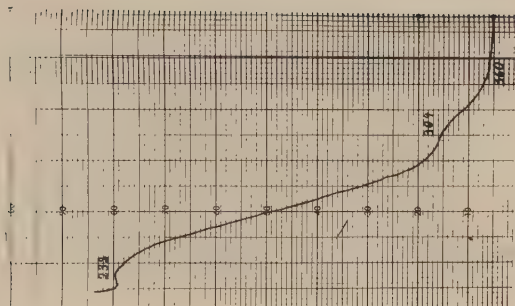
4.1 Binapacryl

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

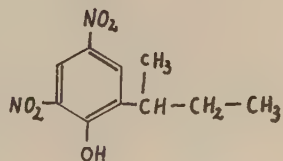
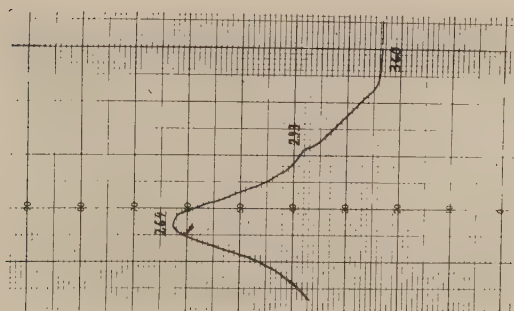


4.2 Dinoseb

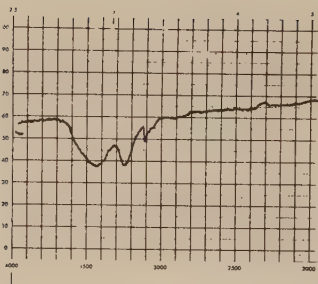
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



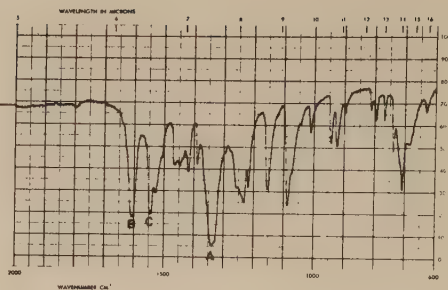
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

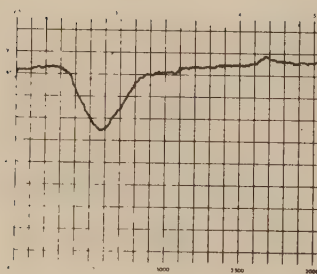


4.3 DNOC

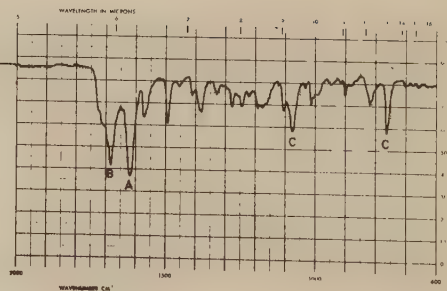


IR-Spektrum (KBr-Pressling)

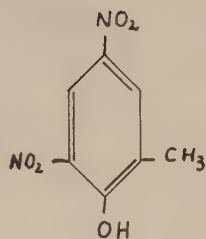
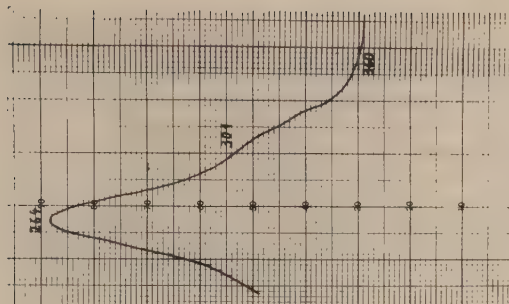
5. CUMARINDERIVATE



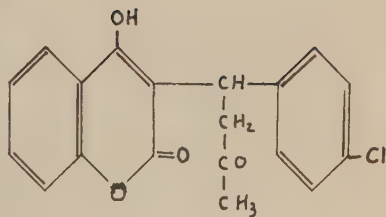
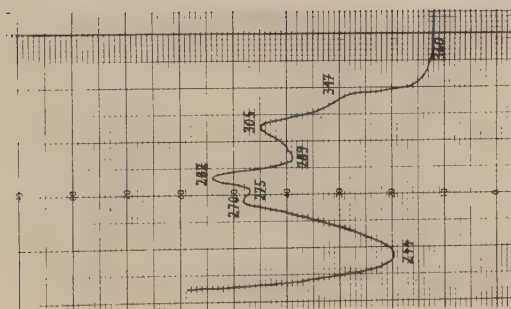
5.1 Coumachlor



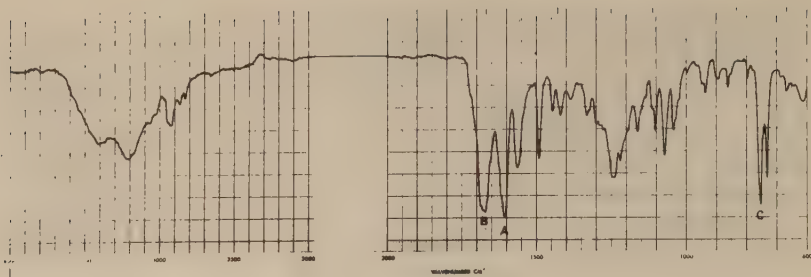
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

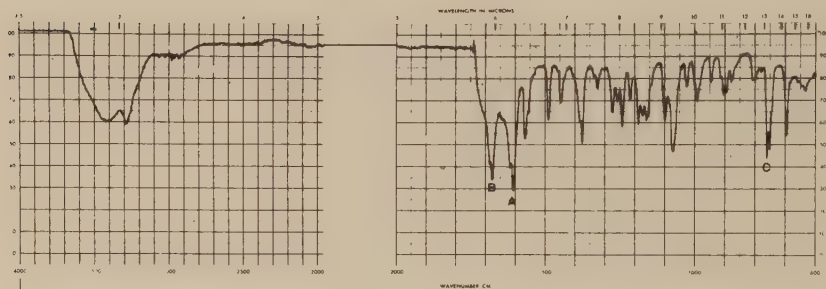


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



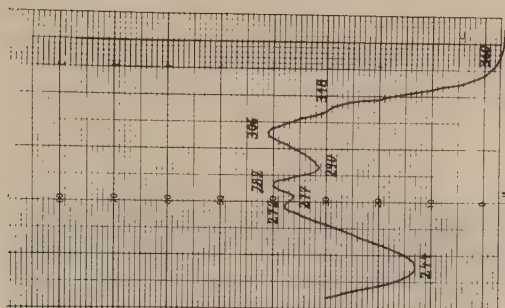
5.2 Coumatetralyl

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

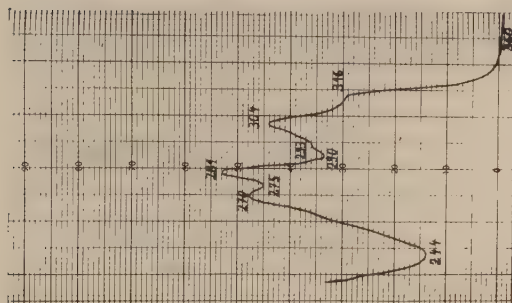
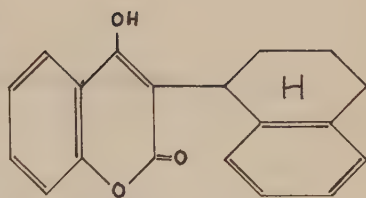


5.3 Warfarin

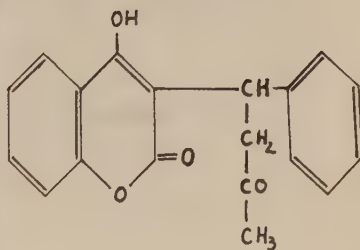
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



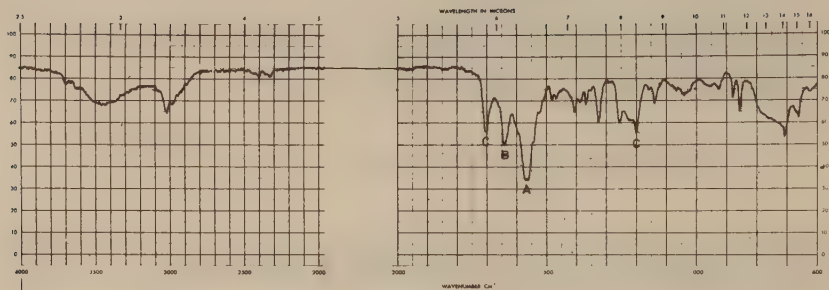
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



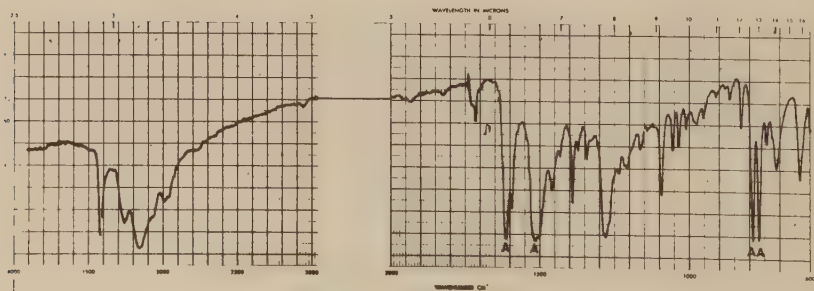
6. INDANDIONDERIVATE



6.1 Pinone

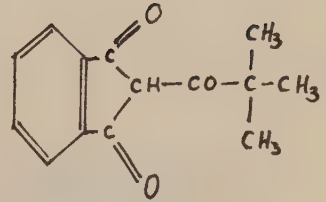
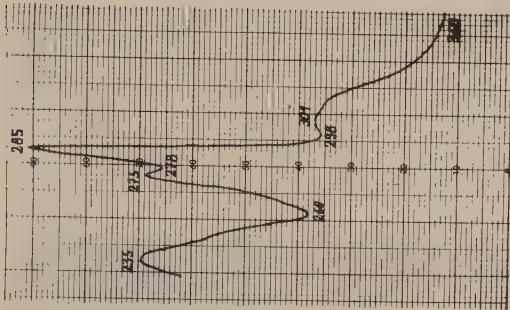
IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

7. THIOHARNSTOFFDERIVATE

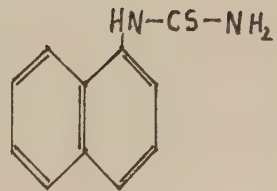
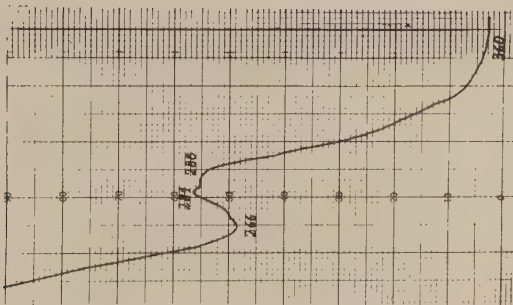


7.1 ANTU

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

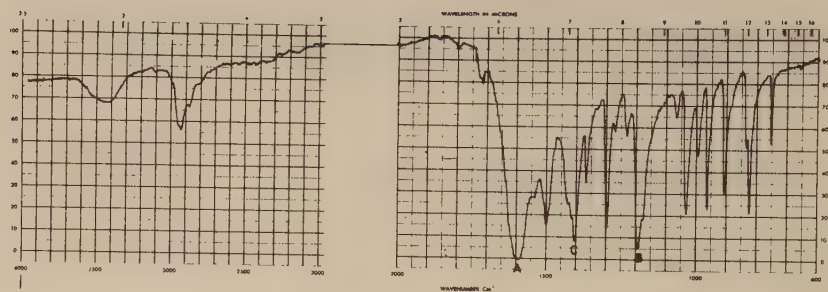


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



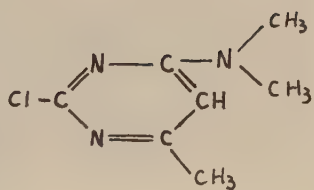
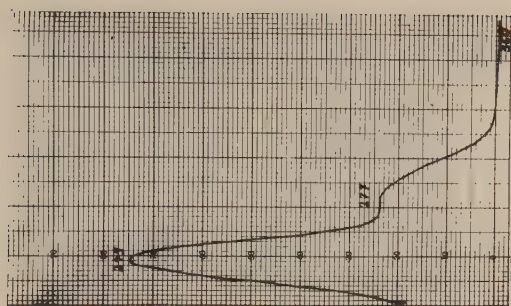
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

8. PYRIMIDINDERIVATE



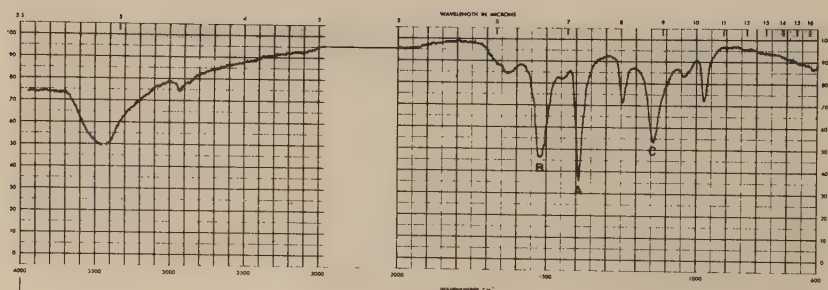
8.1 Crimidine

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



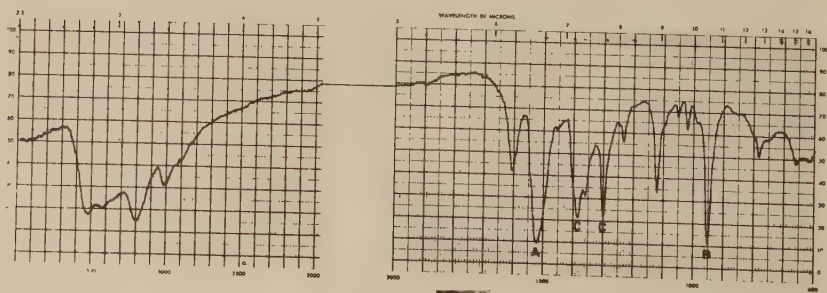
UV-Spektrum (in CH₃OH gelöst)

9. THIURAME und THIOCARBAMATE



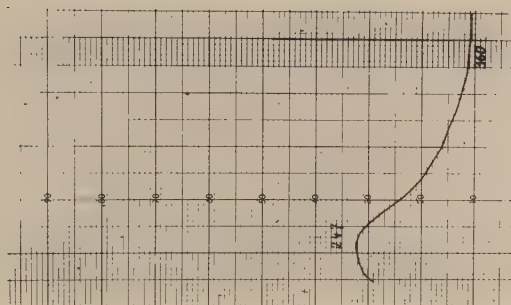
9.1 Ferbam

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

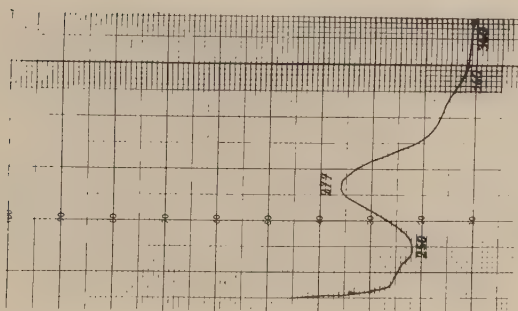
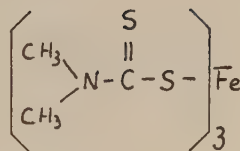


9.2 Maneb

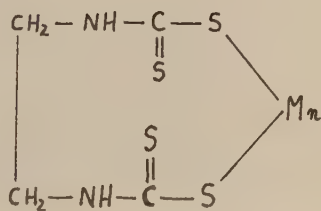
IR-Spektrum (KBr-Pressling)

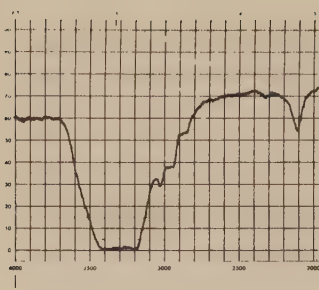


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



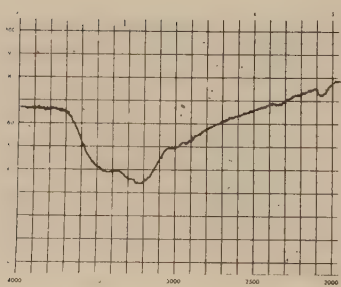
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





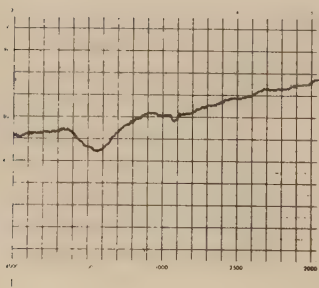
9.3 Metham

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



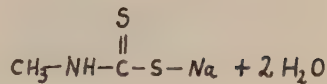
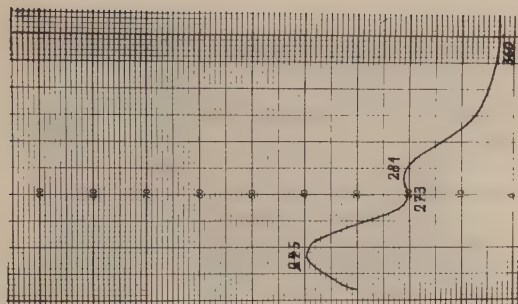
9.4 Metiram

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

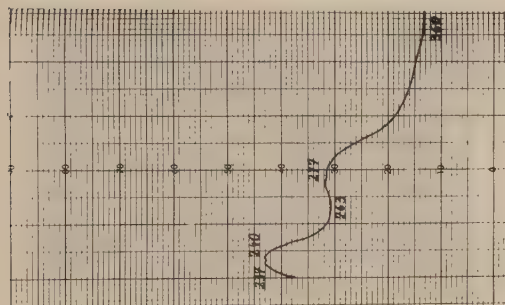


9.5 Thiram

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

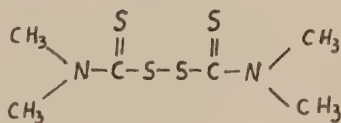
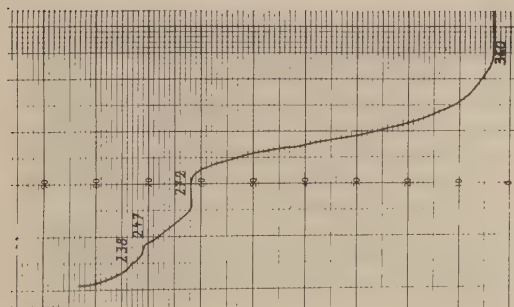


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

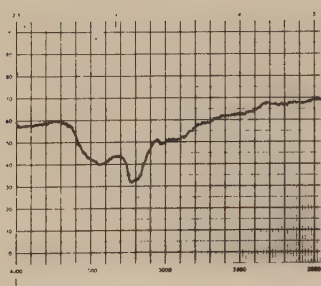


Mischung von Thiuramdisulfiden und Metallsalzen der Dithiocarbaminsäuren

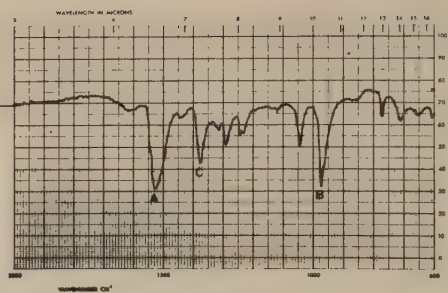
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



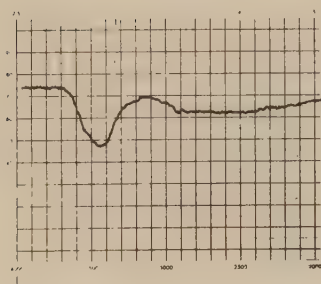
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



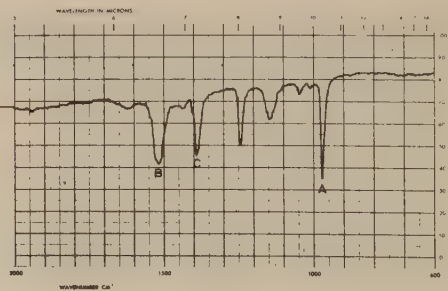
9.6 Zineb



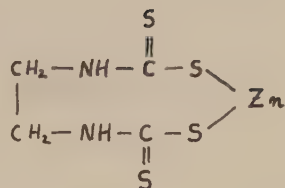
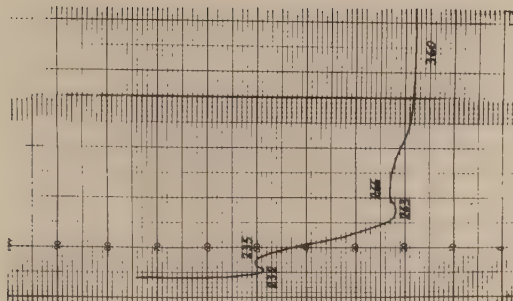
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



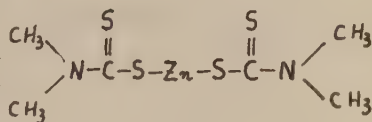
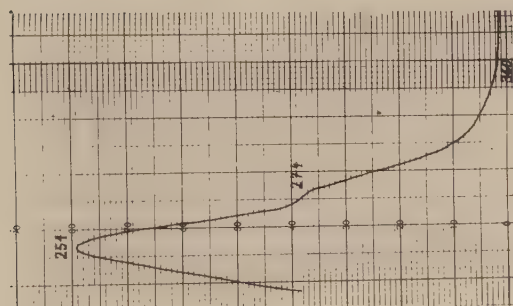
9.7 Ziram



IR-Spektrum (KBr-Pressling)

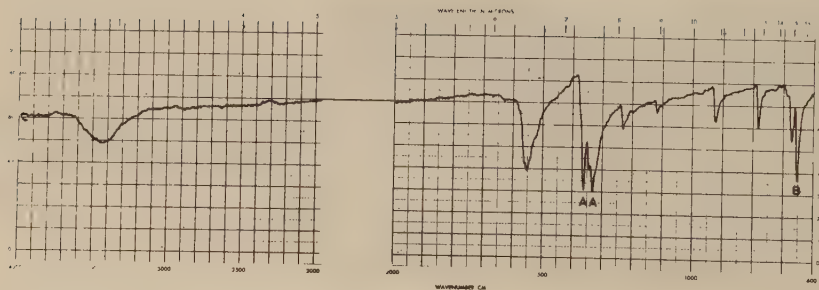


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



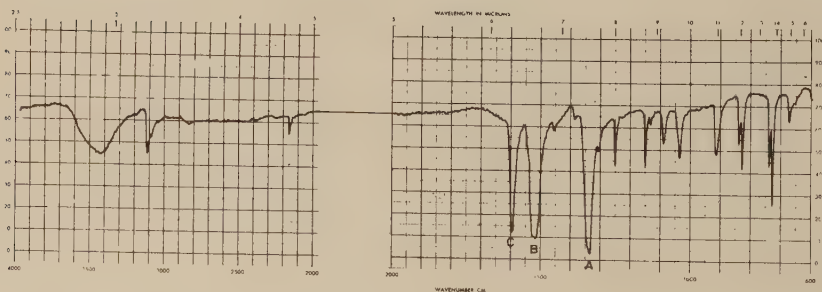
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

10. NITROBENZOLE



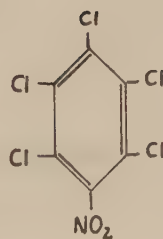
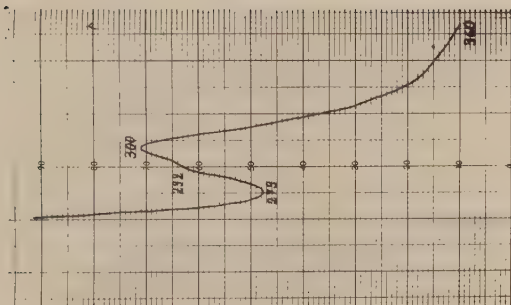
10.1 Quintozen

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

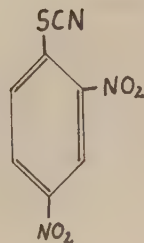
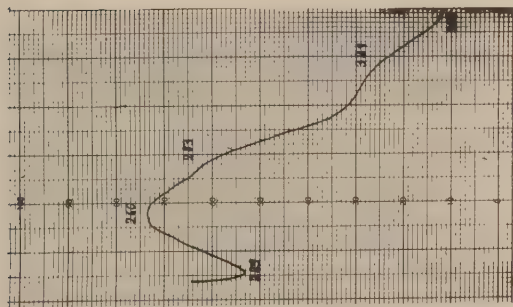


10.2 Rhodandinitrobenzol

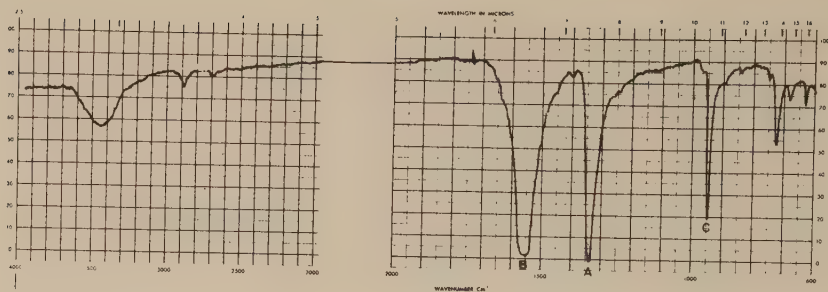
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

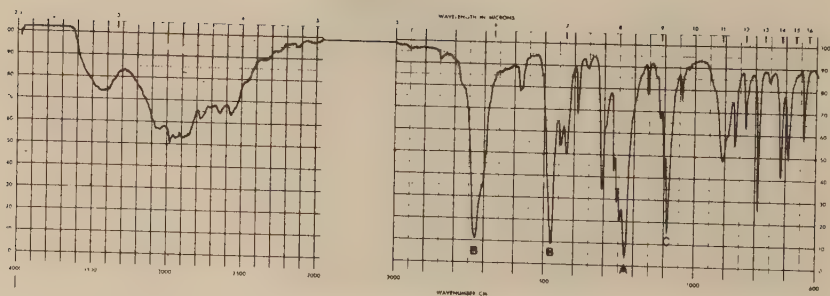


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



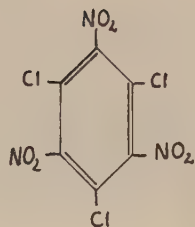
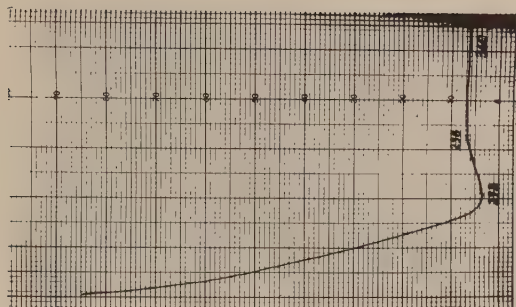
10.3 Trichlorotrinitrobenzol IR-Spektrum (KBr-Pressling)

11. CHLORIerte CARBONSÄUREN

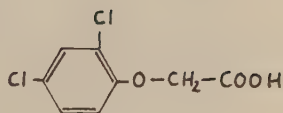
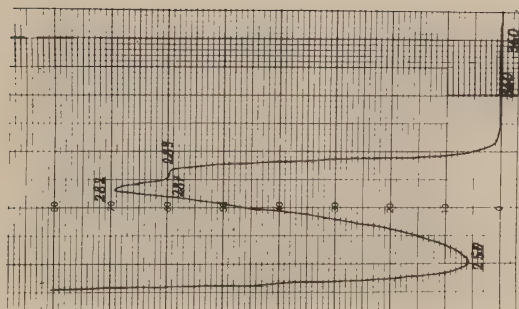


11.1 2,4-D

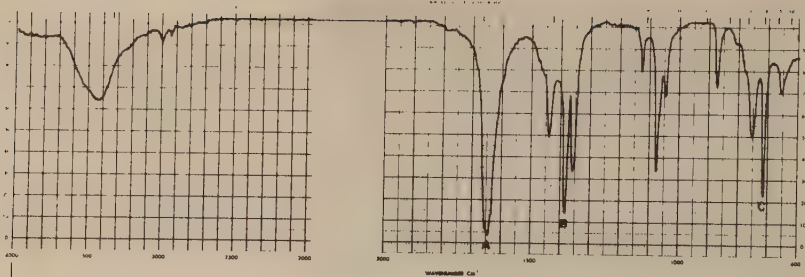
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

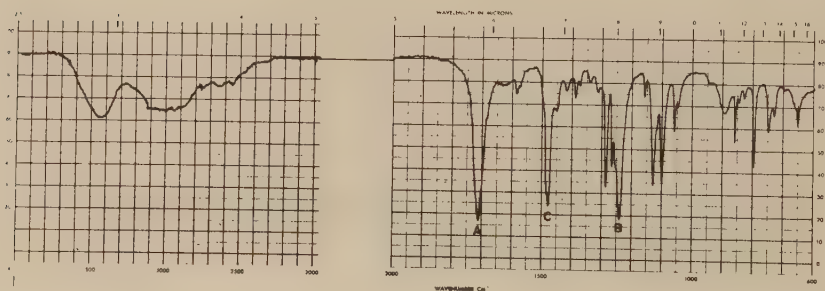


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



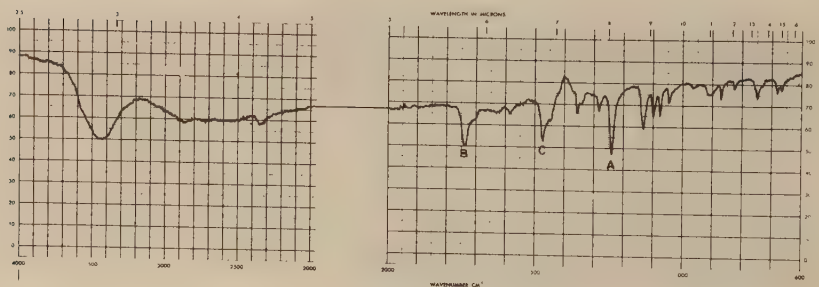
11.2 Dalapon-Na

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



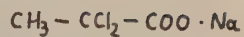
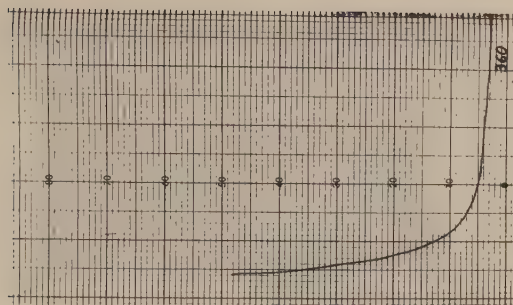
11.3 Dichlorprop

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

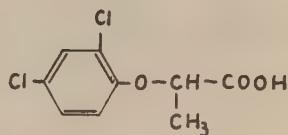
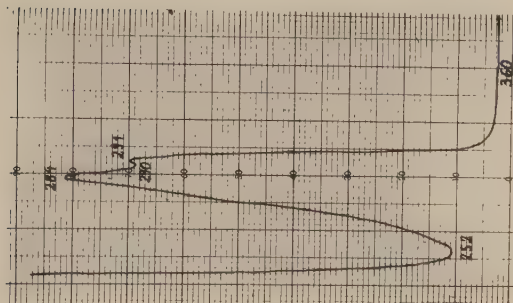


11.4 Fenoprop

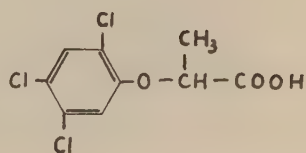
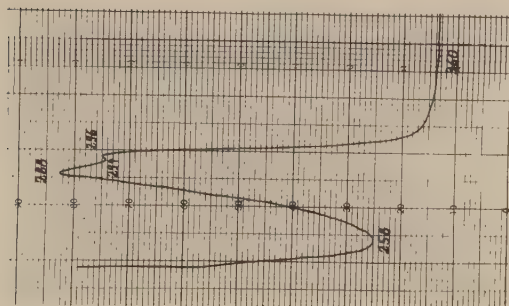
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



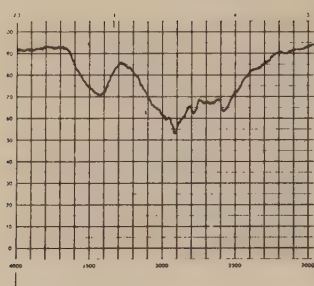
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



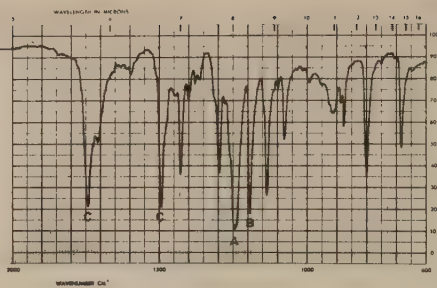
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



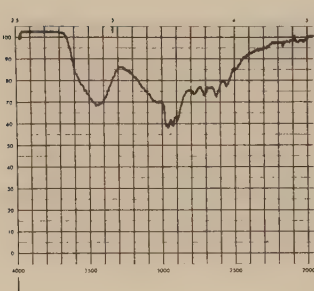
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



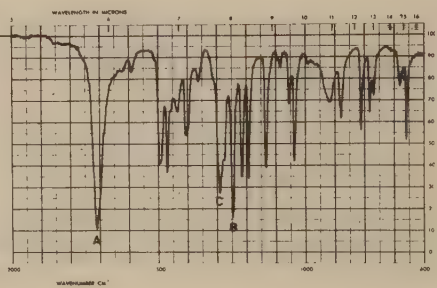
11.5 MCPA



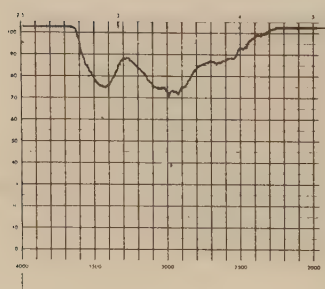
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



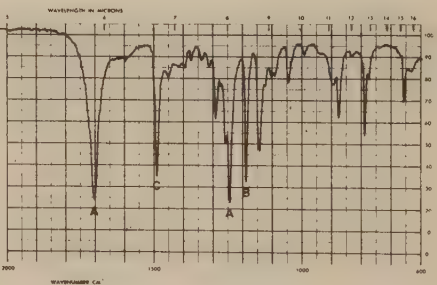
11.6 MCPB



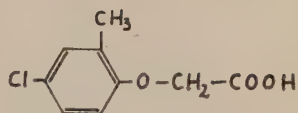
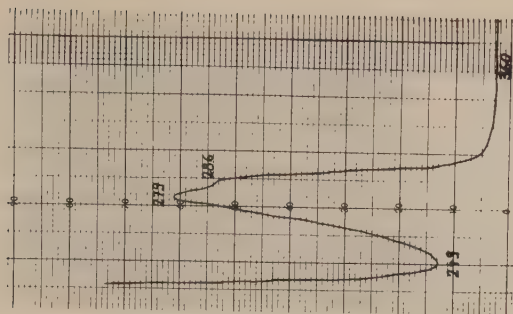
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



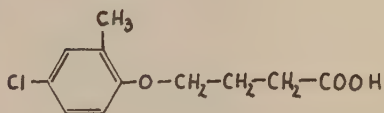
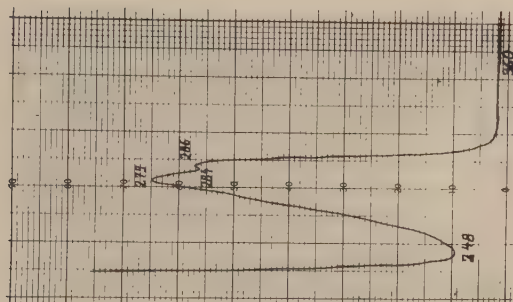
11.7 Mecoprop



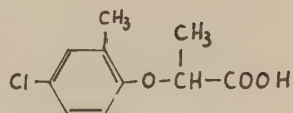
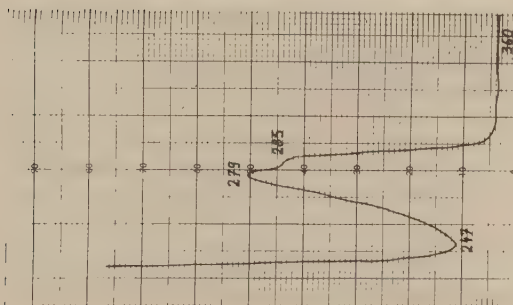
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



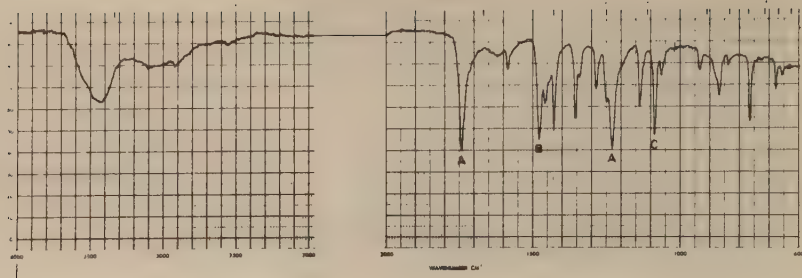
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

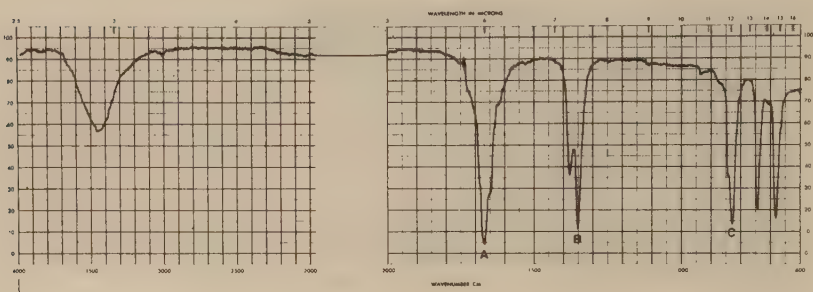


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



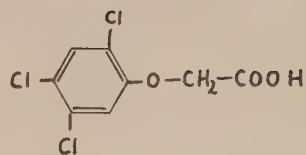
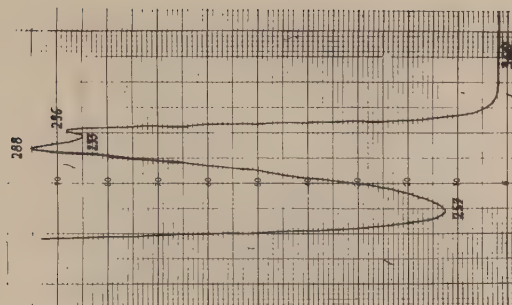
11.8 2,4,5-T

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

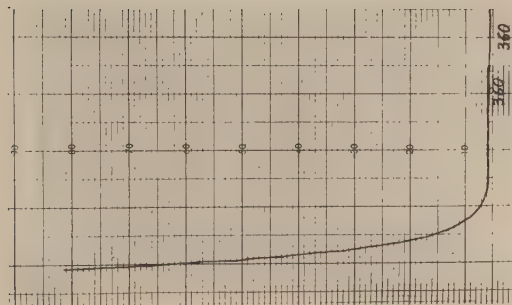


11.9 TCA

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

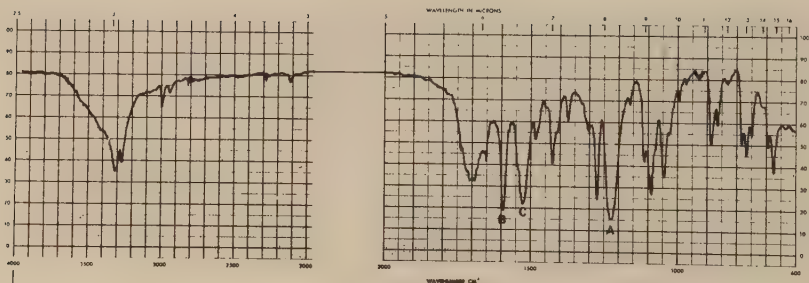


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



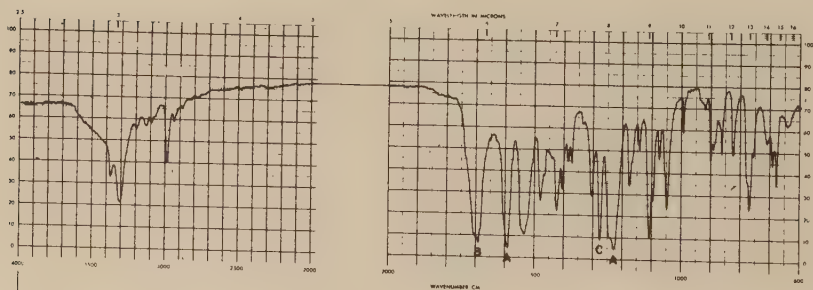
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

12. HERBIZIDE CARBAMATE



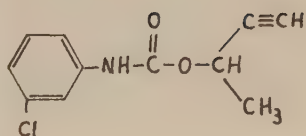
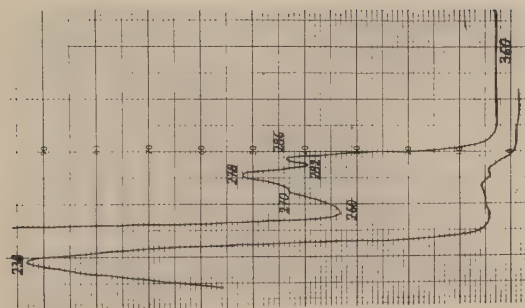
12.1 Chlorbufam

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

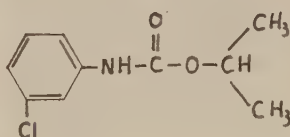
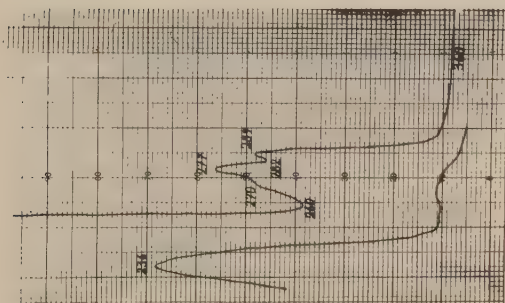


12.2 Chlorpropham

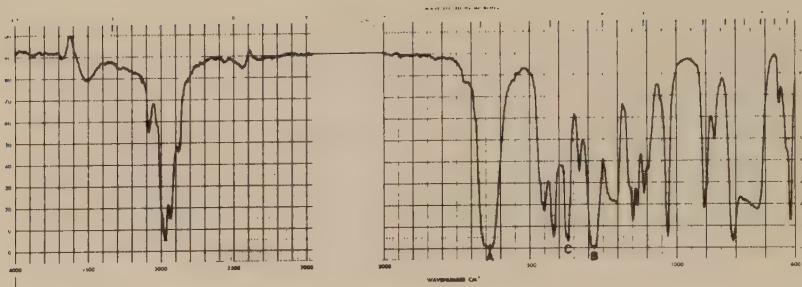
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

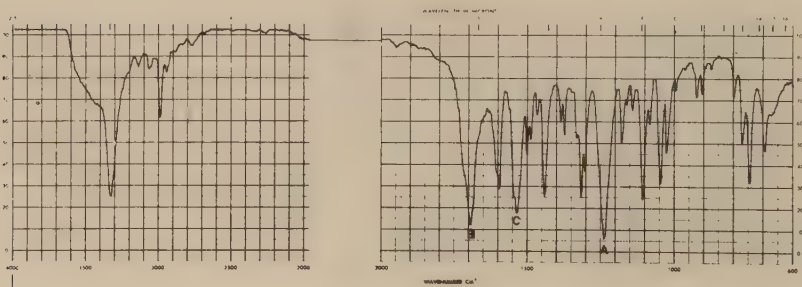


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



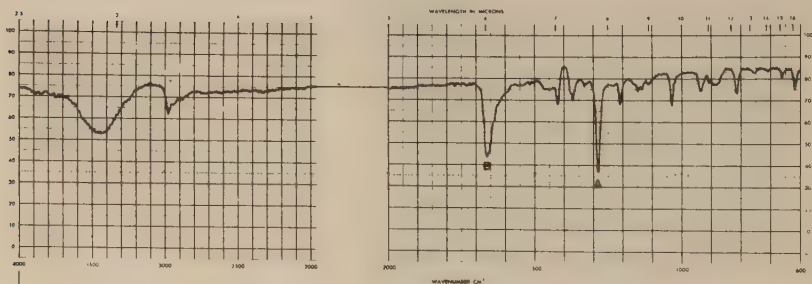
12.3 Diallate

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



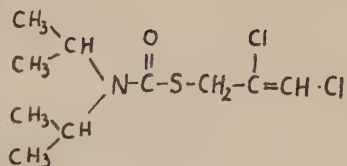
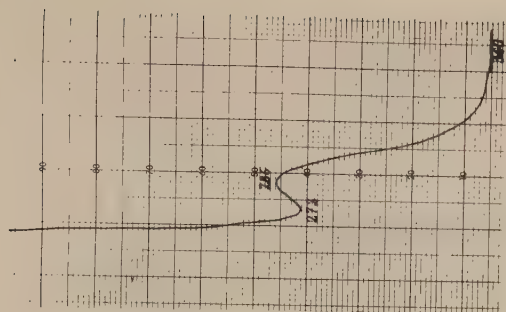
12.4 Propham

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

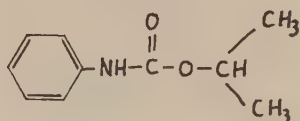
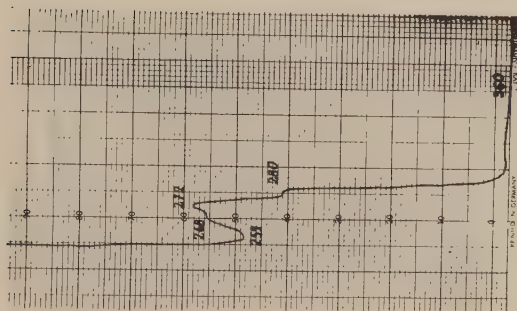


12.5 Triallate

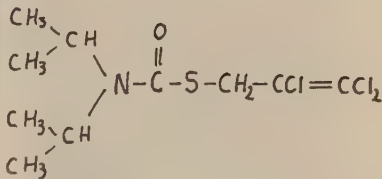
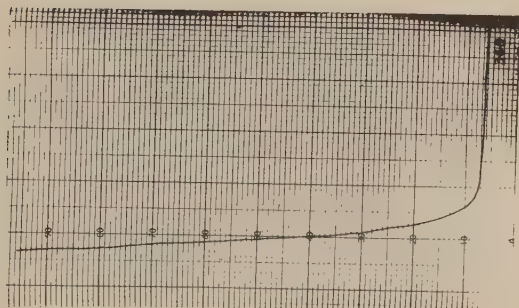
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

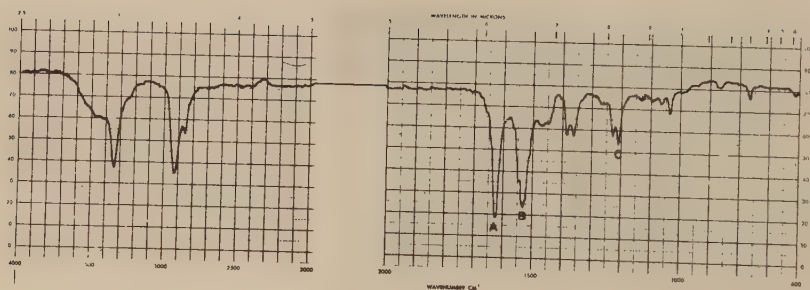


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



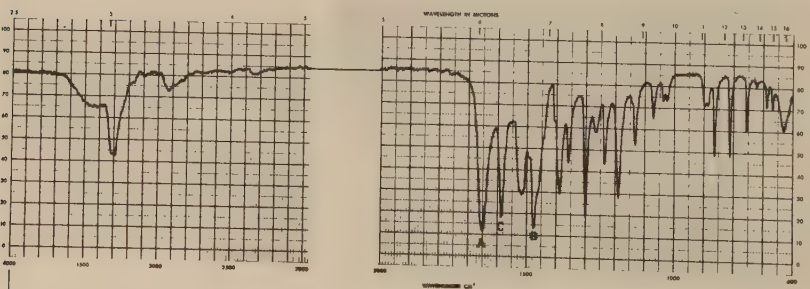
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

13. HERBIZIDE HARNSTOFFVERBINDUNGEN



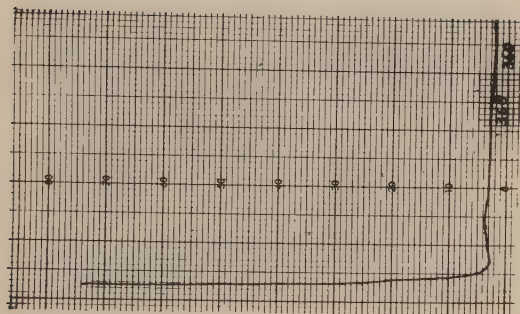
13.1 Cycluron

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

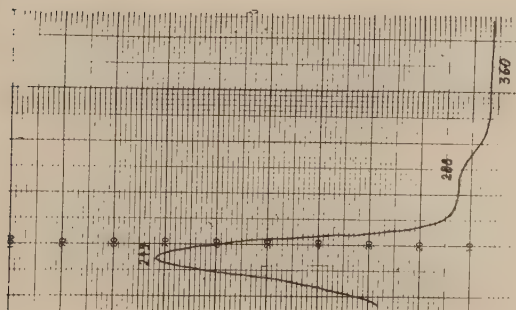
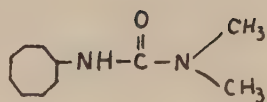


13.2 Diuron

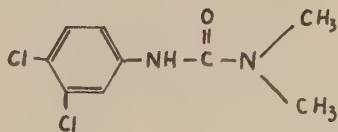
IR-Spektrum (KBr-Pressling)

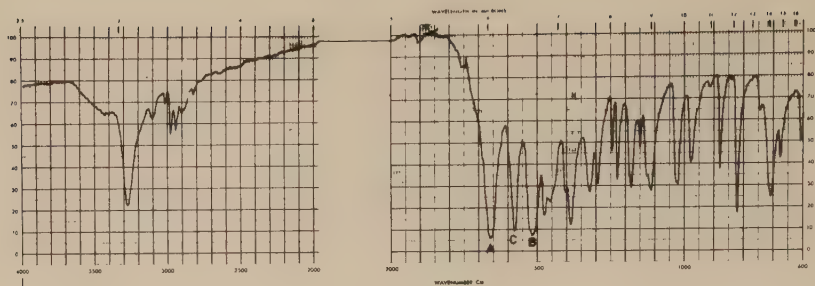


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



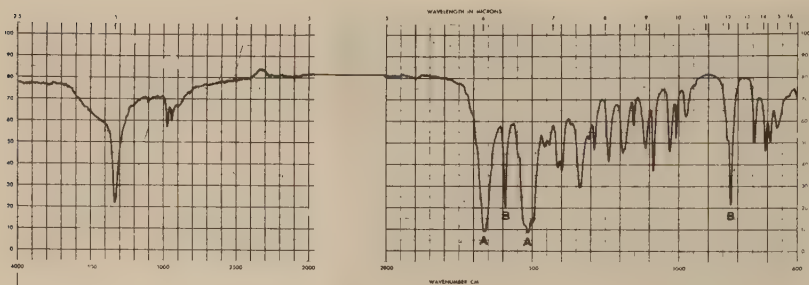
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





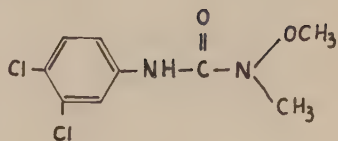
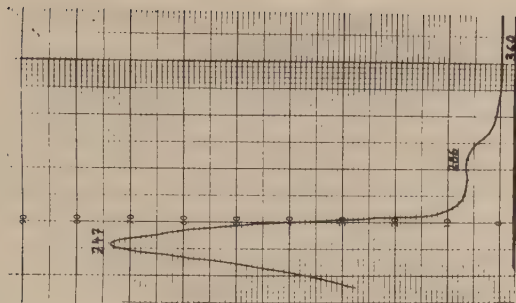
13.3 Linuron

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

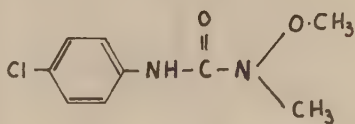
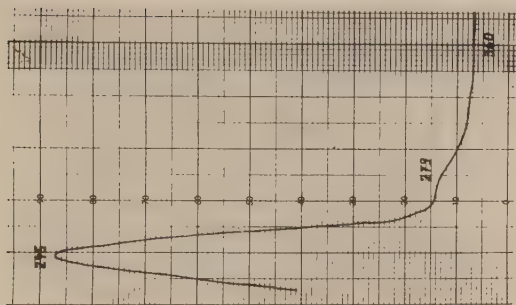


13.4 Monolinuron

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

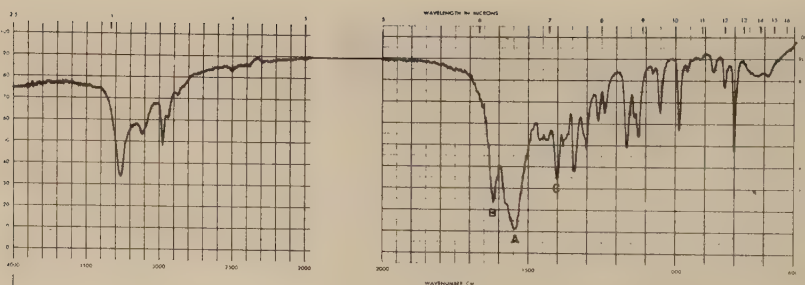


UV-Spektrum (in CH₃OH gelöst)



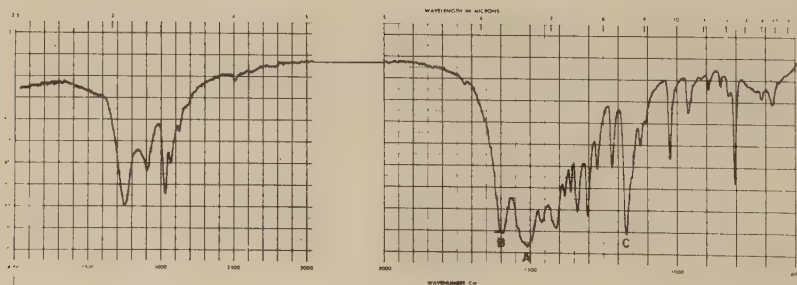
UV-Spektrum (in CH₃OH gelöst)

14. TRIAZINE



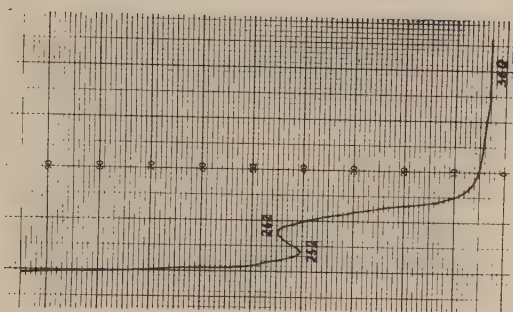
14.1 Atrazin

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

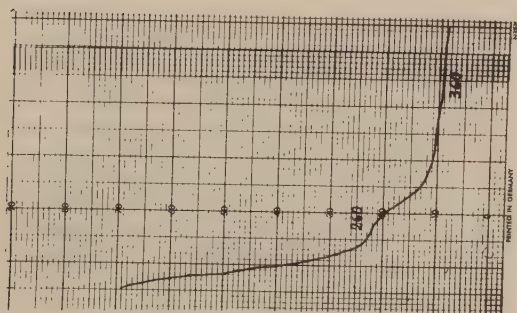
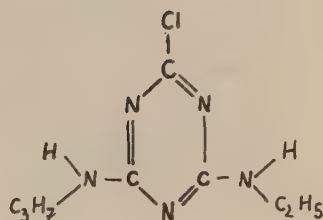


14.2 Prometryn

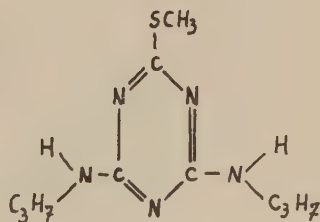
IR-Spektrum (KBr-Pressling)

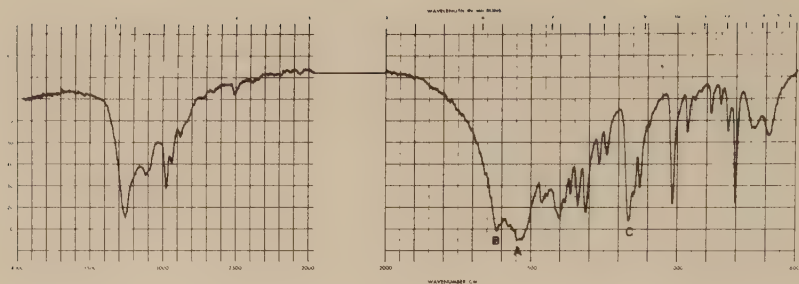


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



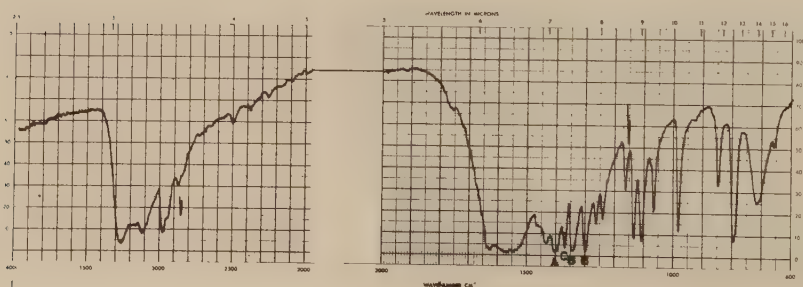
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





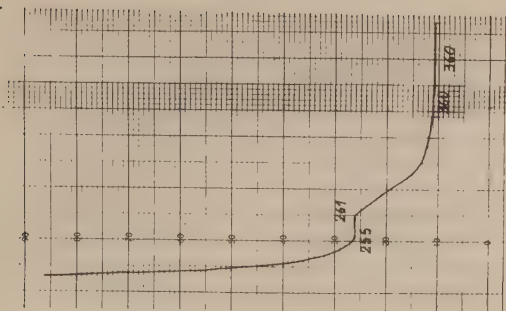
14.3 Propazin

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

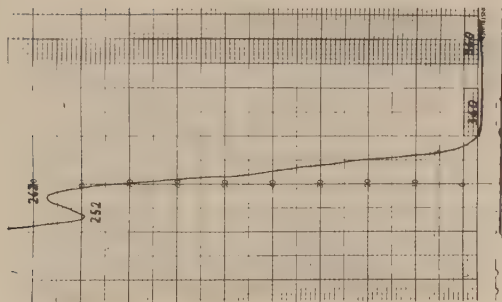
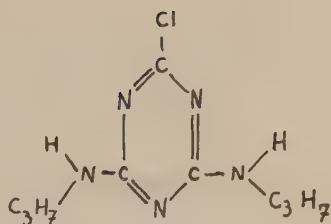


14.4 Simazin

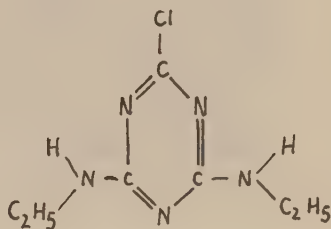
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



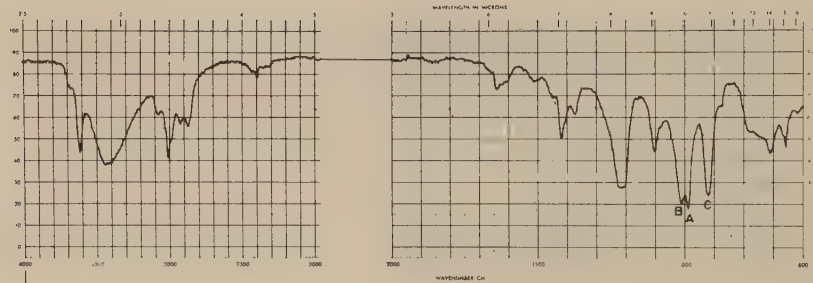
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

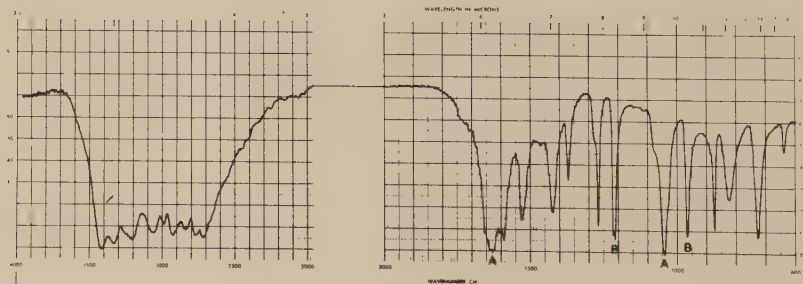


15. SONSTIGE STOFFE



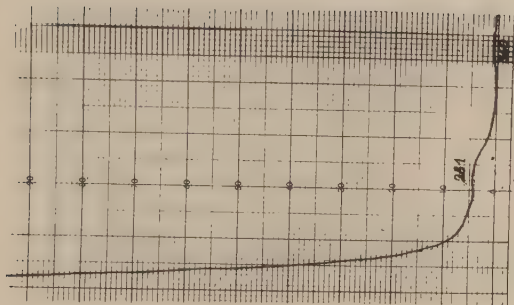
15.1 Allylalkohol

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)

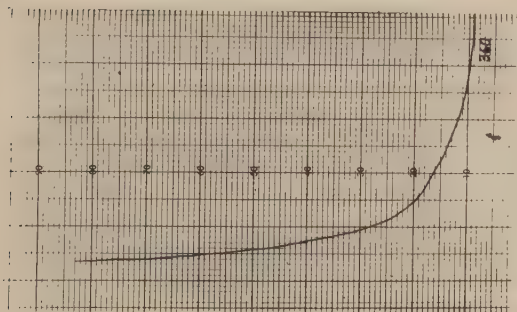
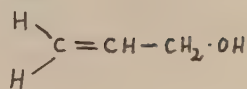


15.2 Aminotriazol

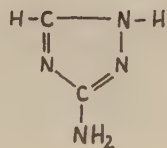
IR-Spektrum (KBr-Pressling)

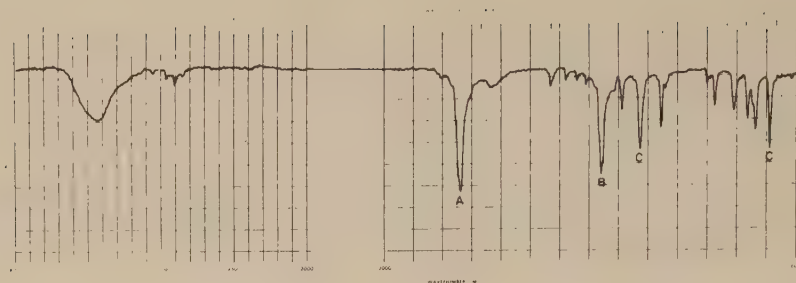


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



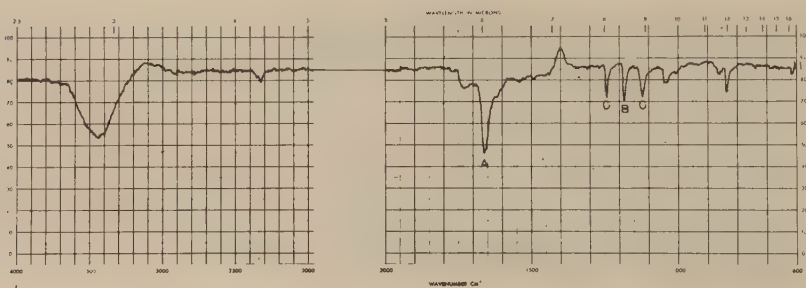
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





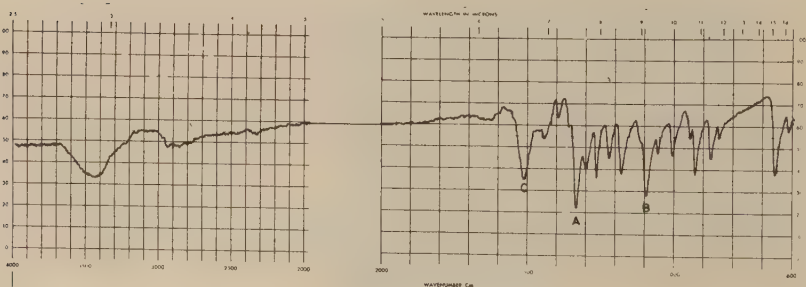
15.3 Captan

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



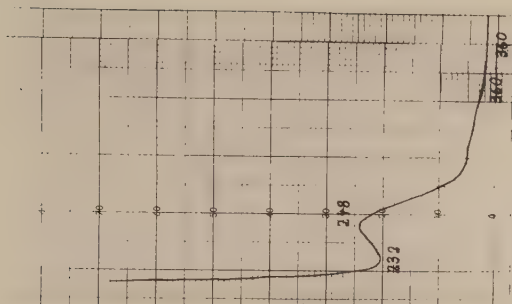
15.4 Chinothionat

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

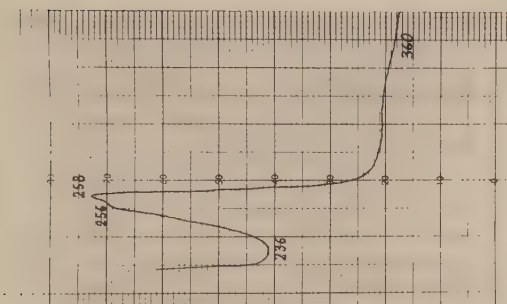
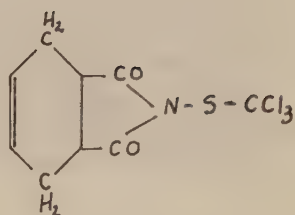


15.5 Dazomet

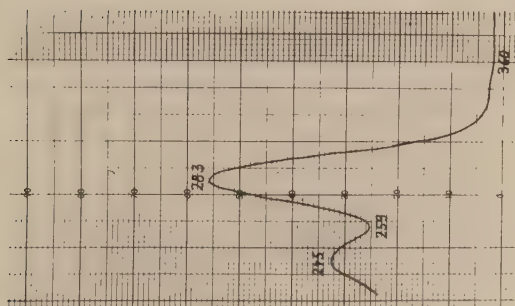
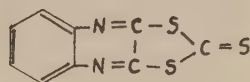
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



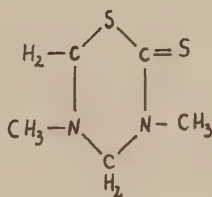
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

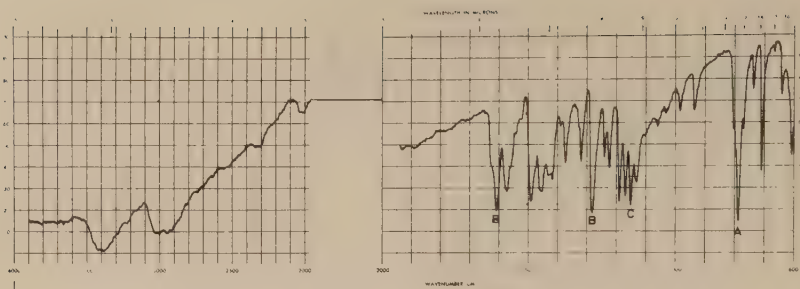


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



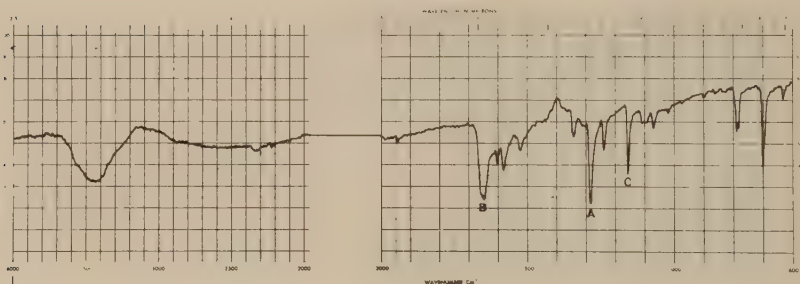
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)





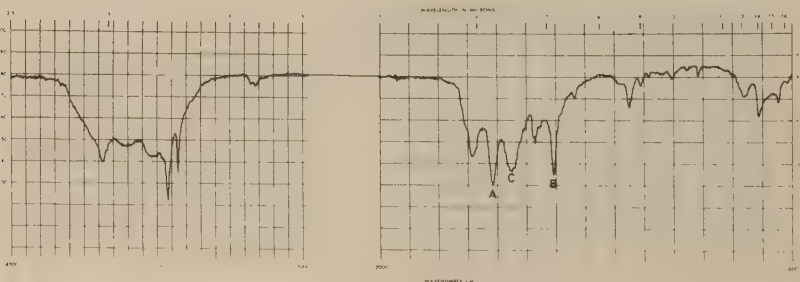
15.6 Deiquat

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



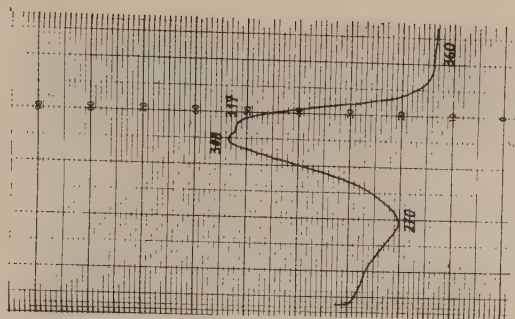
15.7 Dithianon

IR-Spektrum (KBr-Pressling)

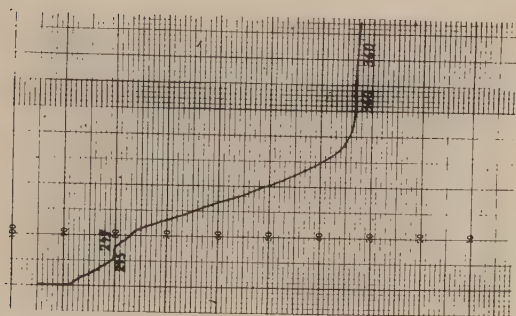
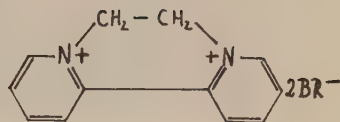


15.8 Dodine

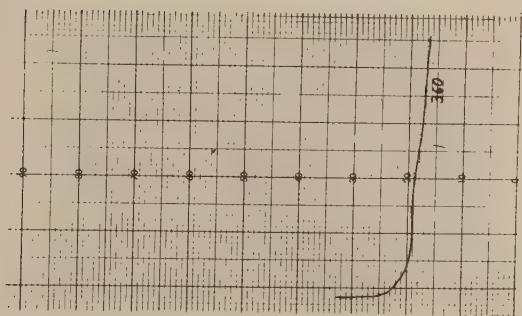
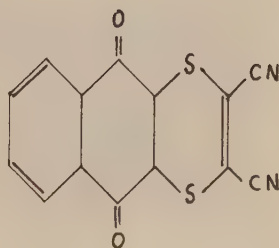
IR-Spektrum (KBr-Pressling)



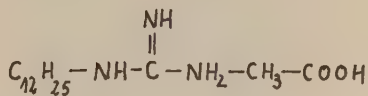
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

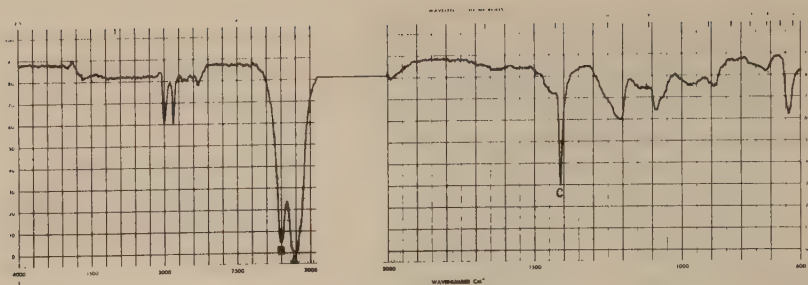


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

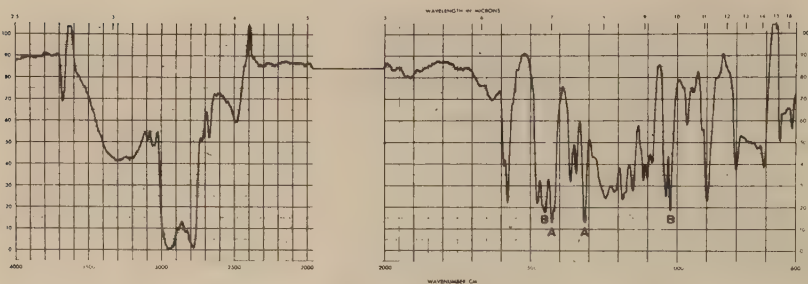


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

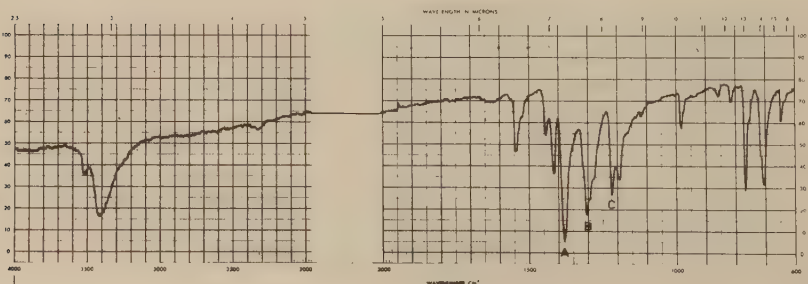




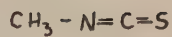
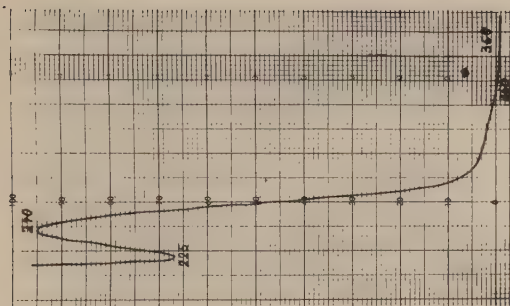
15.9 Methylisothiocyanat IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



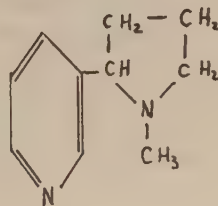
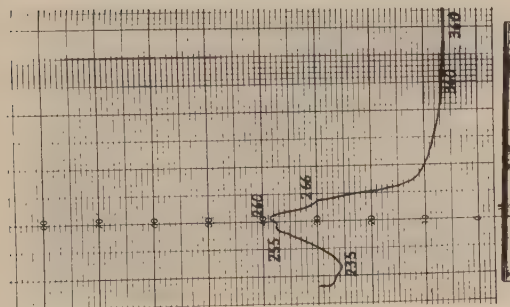
15.10 Nikotin IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



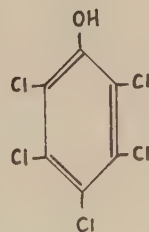
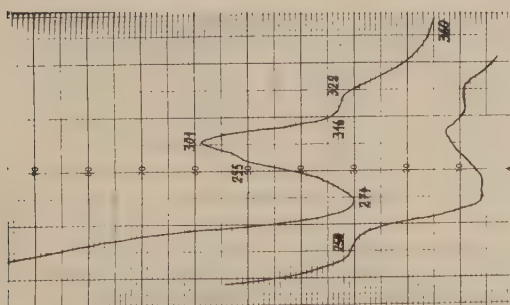
15.11 Pentachlorophenol IR-Spektrum (KBr-Pressling)



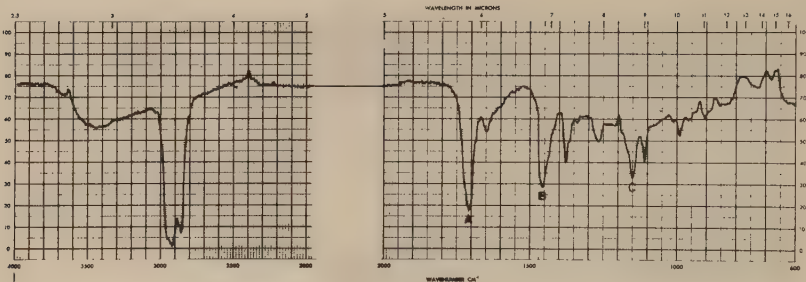
UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

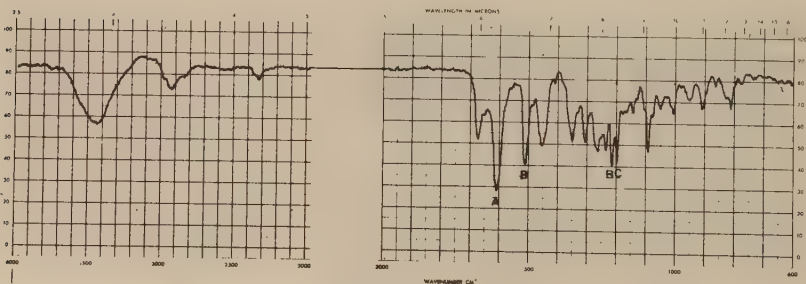


UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



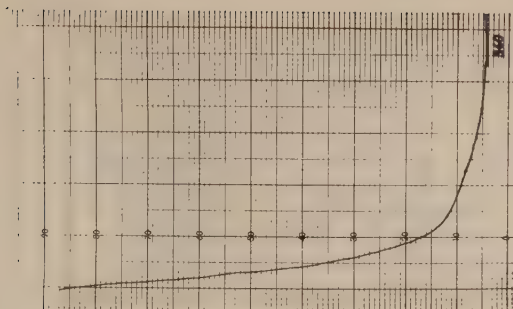
15.12 Pyrethrum

IR-Spektrum (in CHCl_3 gelöst)



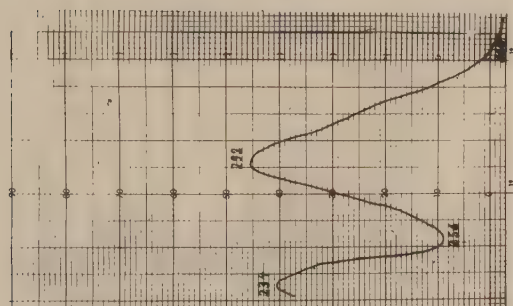
15.13 Rotenon

IR-Spektrum (KBr-Pressling)



Pyrethrine und Cinerolone

UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)



Pflanzenextrakt aus
Derris elliptica

UV-Spektrum (in CH_3OH gelöst)

IV. Zusammenstellung der drei stärksten IR-Banden, der UV-Maxima und der UV-Minima nach Wirkstoffgruppen

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>1. Chlorierte Kohlenwasserstoffe</u>				
1.1	DDT	A 762 B 777 C 1090	<u>234</u> 266, 254, 275	<u>224</u> 248, 271
1.2	Methoxychlor	A 1248 B 1178, 1505 C 1027	<u>226</u> 241, 269, 280	<u>239</u> 266
1.3	Hexachlorcyclo- hexan	A 682 B 780 C 848, 1342	---	---

--- kein Maximum und kein Minimum
zwischen 200 und 360 nm

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
1.4	Lindane	A 681 B 847 C 775	---	---
1.5	Aldrin	A 695 B 720, 1032 C 1255	---	---
1.6	Dieldrin	A 842 B 1038 C 700, 805, 1002	---	---
1.7	Endrin	A 745 B 843 C 716	---	---
1.8	Chlordan	A 1071 B 900, 1268, 1601 C ---	---	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
1.9	Heptachlor	A 765 B 782,1248 C 895,1036	---	---
1.10	Toxaphen	A 860 B 885 C 945,1302	<u>250</u>	---
1.11	Chlorfenson	A 765,855,1173 B 1083,1373 C ---	264 267,257,275	<u>261</u> 273,255,266
1.12	D-D	A 935 B 1630 C 668	---	---
1.13	Endosulfan	A 1190 B 771,978 C 750	---	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
1.14	Hexachlor- benzol	A 1342 B 792 C 1295	<u>289</u> 299	<u>283</u>
1.15	Tetradifon	A 1160, 1395 B 755 C 1085	<u>234</u> 246, 286, 295, 277	<u>282</u> 292, 241, 275
1.16	Tetrasul	A 1430 B 1065 C 818, 1110	<u>257</u> 278	<u>244</u>

2. Organische Phosphorverbindungen

2.1	Chlorthion	A 1038 B 952 C 1530	<u>261</u>	<u>244</u>
-----	------------	---------------------------	------------	------------

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
2.2	Demeton-S-Methyl	A 1020 B 1250 C 825	---	---
2.3	Diazinon	A 1030 B 1565 C 968,1267	<u>277</u> 257	<u>231</u>
2.4	Dichlorphos	A 1049 B 1145 C 858,979,1280	---	---
2.5	Dimefox	A 995 B 1305 C 749	---	---
2.6	Dimethoate	A 1008 B 650,1647 C 839	---	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
2.7	Disulfoton	A 1112 B 955 C 652	---	---
2.8	Endothion	A 1225 B 1029 C 1640	268 239	<u>248</u>
2.9	Fenthion	A 1024 B 830, 959, 1002 C ---	251 285	---
2.10	Folithion	A 822, 1035 B 968 C 1345	264	<u>241</u>
2.11	Gusathion-A	A 998 B 970 C 647, 949, 1684	281 298, 312	<u>261</u>

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
2.12	Gusathion-M	A 1008 B 655 C 830, 1673	<u>282</u> 299, 312	<u>262</u>
2.13	Malathion	A 1015 B 1728 C 648	---	---
2.14	Parathion	A 1021 B 919, 1349 C 1521	<u>270</u>	<u>233</u>
2.15	Parathion- methyl	A 1038 B 1349 C 925	<u>269</u>	<u>230</u>
2.16	Phenkapton	A 1009 B 1034 C 650, 960	<u>257</u> 290, 300	<u>245</u> 287

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
2.17	Sulfotepp	A 1024 B 935 C 968	<u>255</u> 280	<u>242</u>
2.18	Trichlorphon	A 1035 B 1239 C 720	<u>232</u> 272	<u>259</u>
<u>2. Insektizide und akarazide Carbamate</u>				
3.1	Carbaryl	A 1710 B 1223 C 1252	<u>279</u> 269, 289, 286	<u>238</u> 272
3.2	Dimetan	A 1730 B 1132 C 1165	<u>237</u>	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
3.3	Dimetilan	A 1725 B 1685 C 1160	<u>294</u>	<u>282</u>
3.4	Mercaptodi- methur	A 1251 B 1155, 1710 C 1532	<u>265</u>	<u>246</u>
3.5	Propoxur	A 1252 B 1710 C 1195, 1495	<u>269</u> 276	<u>237</u>
<u>4. Dinitro-Verbindungen</u>				
4.1	Binapacryl	A 1110, 1343 B 1052, 1530 C ---	<u>232</u> 304	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
4.2	Dinoseb	A 1342 B 1610 C 1552	<u>264</u> 293	---
4.3	DNOC	A 1338 B 1605 C 1545	<u>264</u> <u>301</u>	---
<u>5. Cumarinderivate</u>				
5.1	Coumachlor	A 1618 B 1682 C 765, 1075	<u>282</u> <u>305, 270, 317</u>	<u>244</u> 289, 275
5.2	Coumatetralyl	A 1605 B 1672 C 755	<u>306</u> <u>282, 272, 318</u>	<u>244</u> 290, 277

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
5.3	Warfarin	A 1608 B 1678 C 760	<u>281</u> 304, 270, 316, 293	<u>244</u> 290, 275
<u>6. Indandionderivate</u>				
6.1	Pindone	A 1565 B 1640 C 1200, 1702	<u>285</u> 235, 275, 301	<u>260</u> 278, 298
<u>7. Thioharnstoffderivate</u>				
7.1	ANTU	A 769, 789, 1513, 1612 B --- C ---	<u>281</u> 288	<u>266</u>

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>8. Pyrimidinderivate</u>				
8.1	Crimidine	A 1595 B 1192 C 1405	<u>249</u> 277	---
<u>9. Thiurame und Thiocarbamate</u>				
9.1	Ferbam	A 1391 B 1520 C 1143	<u>247</u>	---
9.2	Maneb	A 1621 B 951 C 1300, 1385	<u>277</u>	<u>250</u>
9.3	Metham	A 951 B 935 C 1525	<u>245</u> 281	<u>273</u>

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
9.4	Metiram	A 1504 B 1232 C 971, 1316	<u>240</u> 237, 277	<u>263</u>
9.5	Thiram	A 1232, 1371 B 1495 C 967	<u>272</u> 247, 238	---
9.6	Zineb	A 1528 B 972 C 1378	<u>235</u> 266	<u>232</u> 263
9.7	Ziram	A 970 B 1517 C 1392	<u>251</u> 274	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>10. Nitrobenzole</u>				
10.1	Qunitozen	A 1331 B 654 C ---	<u>300</u> 292	<u>279</u>
10.2	Rhondandi- nitrobenzol	A 1335 B 1517 C 1595	<u>260</u> 283, 321	<u>229</u>
10.3	Trichlortri- nitrobenzol	A 1338 B 1550 C 948	<u>296</u>	<u>281</u>
<u>11. Chlorierte Carbonsäuren</u>				
11.1	2,4-D	A 1229 B 1475, 1728 C 1090	<u>282</u> 289	<u>250</u> 287

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
11.2	Dalapon-Na	A 1643 B 1382 C 715	---	---
11.3	Dichlorprop	A 1712 B 1240 C 1478	<u>284</u> 291	<u>252</u> 290
11.4	Fenoprop	A 1240 B 1740 C 1472	<u>288</u> 296	<u>258</u> 294
11.5	MCPA	A 1248 B 1195 C 1495, 1745	<u>279</u> 286	<u>249</u>
11.6	MCPB	A 1710 B 1248 C 1291	<u>279</u> 286	<u>248</u> 284

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
11.7	Mecoprop	A 1244, 1702 B 1688 C 1490	<u>279</u> 285	<u>247</u>
11.8	2, 4, 5-T	A 1230, 1741 B 1578 C 1088	<u>288</u> 296	<u>257</u> 293
11.9	TCA	A 1668 B 1350 C 829	---	---
<u>12. Herbizide Carbamate</u>				
12.1	Chlorbufam	A 1227 B 1595 C 1528	<u>238</u> 278, 285, 272	<u>260</u> 282

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
12.2	Chlorpropham	A 1228, 1590 B 1690 C 1275	<u>236</u> 277, 284, 270	<u>260</u> 282
12.3	Diallate	A 1635 B 1280 C 1369	<u>286</u>	<u>272</u>
12.4	Propham	A 1238 B 1695 C 1535	<u>272</u> 268, 280	<u>259</u>
12.5	Triallate	A 1284 B 1663 C ---	---	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>13. Herbizide Harnstoffverbindungen</u>				
13.1	Cycluron	A 1624 B 1532 C 1210	---	---
13.2	Diuron	A 1650 B 1475 C 1588	<u>249</u> 288	---
13.3	Linuron	A 1660 B 1517 C 1578	<u>247</u> 286	---
13.4	Monolinuron	A 1515, 1663 B 825, 1590 C ---	<u>245</u> 279	---

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>14. Triazine</u>				
14.1	Atrazin	A 1545 B 1620 C 1401	<u>262</u>	<u>252</u>
14.2	Prometryn	A 1510 B 1595 C 1171	<u>260</u>	---
14.3	Propazin	A 1545 B 1628 C 1167	<u>261</u>	<u>255</u>
14.4	Simazin	A 1402 B 1299, 1344 C 1370	<u>262</u>	<u>252</u>

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm ⁻¹	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
<u>15. Sonstige Stoffe</u>				
15.1	Allylalkohol	A 988 B 1012 C 920	<u>281</u>	---
15.2	Aminotriazol	A 1042, 1630 B 965, 1210 C ---	---	---
15.3	Captan	A 1739 B 1259 C 690, 1127	<u>248</u>	<u>233</u>
15.4	Chinothionat	A 1662 B 1184 C 1120, 1242	<u>258</u> 343, 353, 256	<u>284</u> 236, 348

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
15.5	Dazomet	A 1333 B 1095 C 1523	<u>283</u> 245	<u>259</u>
15.6	Deiquat	A 787 B 1282, 1608 C 1150	<u>308</u> 317	270
15.7	Dithianon	A 1285 B 1648 C 1157	<u>249</u>	<u>245</u>
15.8	Dodine	A 1615 B 1408 C 1552	---	---
15.9	Methyliso- thiocyanat	A 2110 B 2200 C 1412	<u>240</u>	<u>225</u>

Spektrum Nr.	Substanz	IR-Banden in cm^{-1}	UV-Maxima in nm	UV-Minima in nm
15.10	Nikotin	A 1315, 1425 B 1123, 1450 C ---	<u>260</u> 255, 266	<u>235</u>
15.11	Pentachlor- phenol	A 1380 B 1305 C 1219	<u>301</u> 322, 250, 295	<u>274</u> 316
15.12	Pyrethrum	A 1708 B 1455 C 1150	---	---
15.13	Rotenon	A 1610 B 1215, 1510 C 1198	<u>292</u> 234	<u>256</u>

--- kein Maximum und kein Minimum
zwischen 200 und 360 nm

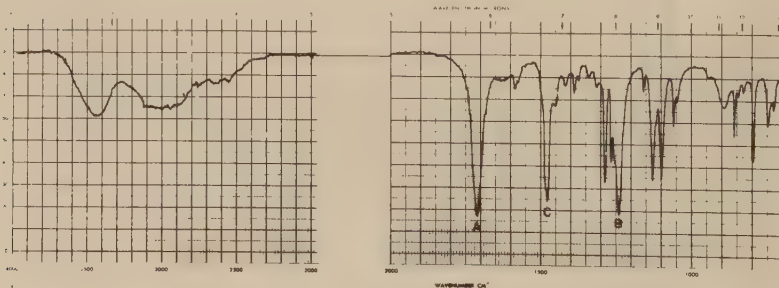
V. Auffindung eines IR-Spektrums anhand der stärksten Banden

a) Anleitung

Von einer unbekannten Substanz werden mit Hilfe der KBr-Presstechnik bzw. in Lösung ein IR-Spektrum im Bereich von 4000 bis 600 cm^{-1} aufgenommen. Im Spektrum werden die stärksten Banden im Bereich von 2000 bis 600 cm^{-1} nach abfallender Intensität mit den Buchstaben A, B, C markiert und die Lage der Banden durch Angabe der Wellenzahl (cm^{-1}) bestimmt.

Die Auffindung des Vergleichsspektrums bzw. Vergleich des Spektrums der unbekannten Substanz mit der Vergleichssubstanz erfolgt nach CLARKE (1969) in folgender Weise:

Das abgebildete Spektrum einer unbekannten Substanz besitzt die drei intensivsten Banden bei 1712 cm^{-1} (A), 1240 cm^{-1} (B) und 1478 cm^{-1} (C).



Mit Hilfe des Verzeichnis der stärksten IR-Banden (Seite 117) werden drei Listen angefertigt, in denen alle Substanzen eingetragen werden, deren stärksten Peaks bei $1712 \pm 2\text{ cm}^{-1}$, $1240 \pm 2\text{ cm}^{-1}$ und $1478 \pm 2\text{ cm}^{-1}$ liegen.

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
-----------------------------------	----------	-----------------------	----------------------

Liste 1

1710	Carbaryl	A	3.1
1710	Propoxur	B	3.5
1710	Mercapto- dimethur	B	3.4
1710	MCPB	A	11.6
1712	<u>Dichlor-</u> <u>prop</u>	A	10.3

Liste 2

1238	Propham	A	12.4
1239	Trichlor- phon	B	2.18
1240	Fenoprop	A	11.4
1240	<u>Dichlor-</u> <u>prop</u>	B	10.3
1242	Chino- thionat	C	15.4

Liste 3

1475	Diuron	B	13.2
1475	2,4-D	B	11.1
1478	<u>Dichlor-</u> <u>prop</u>	C	10.3

Dichlorprop ist die einzige Substanz die in allen drei Listen erscheint. Jetzt wird das Spektrum der unbekannten Substanz mit dem Spektrum von Dichlorprop (10.3) verglichen. In vorliegendem Falle liegt eine Übereinstimmung in der Lage und der relativen Intensität sämtlicher Absorptionsbanden zwischen der unbekannten Substanz und Dichlorprop vor. Es handelt sich also bei unserer unbekannten Substanz um Dichlorprop.

Sollte keine Identität bestehen, müssen neue Listen mit größerer Streubreite der Peaks angefertigt werden:

Liste 1 von 1707 bis 1717 cm^{-1}

Liste 2 von 1235 bis 1245 cm^{-1}

Liste 3 von 1472 bis 1482 cm^{-1}

b) Verzeichnis

der stärksten IR-Banden mit steigender Frequenz

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
647	Gusathion-A	C	2.11
648	Malathion	C	2.13
650	Dimethoate	B	2.6
650	Phenkapton	C	2.16
652	Disulfoton	C	2.7
654	Quintozen	B	10.1
655	Gusathion-M	B	2.12
668	D-D	C	1.12
681	Lindane	A	1.4
682	Hexachlorcyclohexan	A	1.3
690	Captan	C	15.3
695	Aldrin	A	1.5
700	Dieldrin	C	1.6
715	Dalapon-Na	C	11.2
716	Endrin	C	1.7
720	Aldrin	B	1.5
720	Trichlorphon	C	2.18
745	Endrin	A	1.7
749	Dimefox	C	2.5
750	Endosulfan	C	1.13
755	Tetradifon	B	1.15
755	Coumatetralyl	C	5.2
760	Warfarin	C	5.3
762	DDT	A	1.1
765	Heptachlor	A	1.9

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
765	Chlorfenson	A	1.11
765	Coumachlor	C	5.1
769	ANTU	A	7.1
771	Endosulfan	B	1.13
775	Lindane	C	1.4
777	DDT	B	1.1
780	Hexachlorcyclohexan	B	1.3
782	Heptachlor	B	1.9
787	Deiquat	A	15.6
789	ANTU	A	7.1
792	Hexachlorbenzol	B	1.14
805	Dieldrin	C	1.6
818	Tetrasul	C	1.16
822	Folithion	A	2.10
825	Demeton-S-Methyl	C	2.2
825	Monolinuron	B	13.4
829	TCA	C	11.9
830	Fenthion	B	2.9
830	Gusathion-M	A	2.12
839	Dimethoate	C	2.6
842	Dieldrin	A	1.6
843	Endrin	B	1.7
847	Lindane	B	1.4
848	Hexachlorcyclohexan	C	1.3
855	Chlorfenson	A	1.11
858	Dichlorphos	C	2.4
860	Toxaphen	B	1.10
895	Heptachlor	C	1.9
900	Chlordan	B	1.8
919	Parathion	B	2.14

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
920	Allylalkohol	C	15.1
925	Parathion-methyl	C	2.15
935	D-D	A	1.12
935	Sulfotepp	B	2.17
935	Metham	B	9.3
945	Toxaphen	C	1.10
948	Trichlortrinitrobenzol	C	10.3
951	Metham	A	9.3
951	Maneb	B	9.2
952	Chlorthion	B	2.1
955	Disulfoton	B	2.7
959	Fenthion	B	2.9
960	Phenkapton	C	2.16
965	Aminotriazol	B	15.2
967	Thiram	C	9.5
968	Folithion	B	2.10
968	Diazinon	C	2.3
968	Sulfotepp	C	2.17
970	Gusathion-A	B	2.11
970	Ziram	A	9.7
972	Zineb	B	9.6
979	Dichlorphos	C	2.4
988	Allylalkohol	A	15.1
995	Dimefox	A	2.5
998	Gusathion-A	A	2.11
1002	Diieldrin	C	1.6
1002	Fenthion	B	2.9
1008	Dimethoate	A	2.6
1008	Gusathion-M	A	2.12
1009	Phenkapton	A	2.16

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1012	Allylalkohol	B	15.1
1015	Malathion	A	2.13
1020	Demeton-S-Methyl	A	2.2
1021	Parathion	A	2.14
1024	Sulfotepp	A	2.17
1027	Methoxychlor	C	1.2
1029	Endothion	B	2.8
1030	Diazinon	A	2.3
1032	Aldrin	B	1.5
1034	Fenthion	A	2.9
1034	Phenkapton	B	2.16
1035	Folithion	A	2.10
1035	Trichlorphon	A	2.18
1036	Heptachlor	C	1.9
1038	Dieldrin	B	1.6
1038	Chlorthion	A	2.1
1038	Parathion-methyl	A	2.15
1042	Aminotriazol	A	15.2
1049	Dichlorphos	A	2.4
1052	Binapacryl	B	4.1
1065	Tetrasul	B	1.16
1071	Chlordan	A	1.8
1075	Coumachlor	C	5.1
1083	Chlorfenson	B	1.11
1085	Tetradifon	C	1.15
1088	2,4,5-T	C	11.8
1090	DDT	C	1.1
1090	2,4-D	C	11.1
1095	Dazomet	B	15.5
1110	Tetrasul	C	1.16

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1110	Binapacryl	A	4.1
1112	Disulfoton	A	2.7
1120	Chinothionat	C	15.4
1123	Nikotin	B	15.10
1127	Captan	C	15.3
1132	Dimetan	B	3.2
1143	Ferbam	C	9.1
1145	Dichlorphos	B	2.4
1150	Deiquat	C	15.6
1150	Pyrethrum	C	15.12
1155	Mercaptodimethur	B	3.4
1157	Dithianon	C	15.7
1160	Tetradifon	A	1.15
1160	Dimetilan	C	3.3
1165	Dimetan	C	3.2
1167	Propazin	C	14.3
1171	Prometryn	C	14.2
1173	Chlorfenson	A	1.11
1178	Methoxychlor	B	1.2
1184	Chinothionat	B	15.4
1190	Endosulfan	A	1.13
1192	Crimidine	B	8.1
1195	Propoxur	C	3.5
1195	MCPA	B	11.5
1198	Rotenon	C	15.13
1200	Pindone	C	6.1
1210	Cycluron	C	13.1
1210	Aminotriazol	B	15.2
1215	Rotenon	B	15.13
1219	Pentachlorphenol	C	15.11

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1223	Carbaryl	B	3.1
1225	Endothion	A	2.8
1227	Chlorbufam	A	12.1
1228	Chlorpropham	A	12.2
1229	2,4-D	A	11.1
1230	2,4,5-T	A	11.8
1232	Thiram	A	9.5
1238	Propham	A	12.4
1239	Trichlorphon	B	2.18
1240	Fenoprop	A	11.4
1240	Dichlorprop	B	11.3
1242	Chinothionat	C	15.4
1244	Mecoprop	A	11.7
1248	Methoxychlor	A	1.2
1248	Heptachlor	B	1.9
1248	MCPA	A	11.5
1248	MCPB	B	11.6
1250	Demeton-S-Methyl	B	2.2
1251	Mercaptodimethur	A	3.4
1252	Propoxur	A	3.5
1252	Carbaryl	C	3.1
1255	Aldrin	C	1.5
1259	Captan	B	15.3
1267	Diazinon	C	2.3
1268	Chlordan	B	1.8
1275	Chlorpropham	C	12.2
1280	Dichlorphos	C	2.4
1280	Diallate	B	12.3
1282	Deiquat	B	15.6
1284	Triallate	A	12.5
1285	Dithianon	A	15.7

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1291	MCPB	C	11.6
1295	Hexachlorbenzol	C	1.14
1299	Simazin	B	14.4
1300	Maneb	C	9.2
1302	Toxaphen	C	1.10
1305	Dimefox	B	2.5
1305	Pentachlorphenol	B	15.11
1315	Nikotin	A	15.10
1331	Quintozen	A	10.1
1333	Dazomet	A	15.5
1335	Rhodandinitrobenzol	A	10.2
1338	DNOC	A	4.3
1338	Trichlortrinitro- benzol	A	10.3
1342	Hexachlorbenzol	A	1.14
1342	Hexachlorcyclohexan	C	1.3
1342	Dinoseb	A	4.2
1343	Binapacryl	A	4.1
1344	Simazin	B	14.4
1345	Folithion	C	2.10
1349	Parathion	B	2.14
1349	Parathion-methyl	B	2.15
1350	TCA	C	11.9
1361	Quintozen	A	10.1
1369	Diallate	C	12.3
1370	Simazin	C	14.4
1371	Thiram	A	9.5
1373	Chlorfenson	B	1.11
1378	Zineb	C	9.6
1380	Pentachlorphenol	A	15 11
1382	Dalapon-Na	B	11.2

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1385	Maneb	C	9.2
1391	Ferbam	A	9.1
1392	Ziram	C	9.7
1395	Tetradifon	A	1.15
1401	Atrazin	C	14.1
1402	Simazin	A	14.4
1405	Crimidine	C	8.1
1408	Dodine	B	15.8
1412	Methylisothiocyanat	C	15.9
1425	Nikotin	A	15.10
1430	Tetrasul	A	1.16
1450	Nikotin	A	15.10
1455	Pyrethrum	B	15.12
1472	Fenoprop	C	11.4
1475	Diuron	B	13.2
1475	2,4-D	B	11.1
1478	Dichlorprop	C	11.3
1490	Mecoprop	C	11.7
1495	Propoxur	C	3.5
1495	Thiram	B	9.5
1495	MCPA	C	11.5
1505	Methoxychlor	B	1.2
1510	Prometryn	A	14.2
1510	Rotenon	B	15.13
1513	ANTU	A	7.1
1515	Monolinuron	A	13.4
1517	Ziram	B	9.7
1517	Rhodandinitrobenzol	B	10.2
1517	Linuron	B	13.3
1520	Ferbam	B	9.1
1521	Parathion	C	2.14

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1523	Dazomet	C	15.5
1528	Metham	C	9.3
1528	Zineb	A	9.6
1528	Chlorbufam	C	12.1
1530	Chlorthion	C	2.1
1530	Binapacryl	B	4.1
1532	Mercaptodimethur	C	3.4
1532	Cycluron	B	13.1
1535	Propham	C	12.4
1545	DNOC	C	4.3
1545	Atrazin	A	14.1
1545	Propazin	A	14.3
1550	Trichlortrinitro- benzol	B	10.3
1552	Dinoseb	C	4.2
1552	Dodine	C	15.8
1565	Diazinon	B	2.3
1565	Pindone	A	6.1
1578	2,4,5-T	B	11.8
1578	Linuron	C	13.3
1588	Diuron	C	13.2
1590	Chlorpropham	A	12.2
1590	Monolinuron	B	13.4
1595	Crimidine	A	8.1
1595	Rhodandinitrobenzol	C	10.2
1595	Chlorbufam	B	12.1
1595	Prometryn	B	14.2
1601	Chlordan	B	1.8
1605	DNOC	B	4.3
1605	Coumatetralyl	A	5.2
1608	Warfarin	A	5.3
1608	Deiquat	B	15.6

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1610	Dinoseb	B	4.2
1610	Rotenon	A	15.13
1612	ANTU	A	7.1
1615	Dodine	A	15.8
1618	Coumachlor	A	5.1
1621	Maneb	A	9.2
1624	Cycluron	A	13.1
1630	D-D	B	1.12
1630	Aminotriazol	A	15.2
1635	Diallate	A	12.3
1640	Endothion	C	2.8
1640	Pindone	B	6.1
1643	Dalapon-Na	A	11.2
1647	Dimethoate	B	2.6
1648	Dithianon	B	15.7
1650	Diuron	A	13.2
1660	Linuron	A	13.3
1662	Chinothionat	A	15.4
1663	Triallate	B	12.5
1663	Monolinuron	A	13.4
1668	TCA	A	11.9
1672	Coumatetralyl	B	5.2
1673	Gusathion-M	C	2.12
1678	Warfarin	B	5.3
1682	Coumachlor	B	5.1
1684	Gusathion-A	C	2.11
1685	Dimetilan	B	3.3
1688	Mecoprop	B	11.7
1690	Chlorpropham	B	12.2
1695	Propham	B	12.4

Wellenzahl in cm^{-1}	Substanz	Banden- intensität	Nr. des Spektrums
1702	Pindone	C	6.1
1708	Pyrethrum	A	15.12
1710	Carbaryl	A	3.1
1710	Propoxur	B	3.5
1710	Mercaptodimethur	B	3.4
1710	MCPB	A	11.6
1712	Dichlorprop	A	11.3
1725	Dimetilan	A	3.3
1728	Malathion	B	2.13
1728	2,4-D	B	11.1
1730	Dimetan	A	3.2
1739	Captan	A	15.3
1740	Fenoprop	B	11.4
1741	2,4,5-T	A	11.8
1745	MCPA	C	11.5
2110	Methylisothio- cyanat	A	15.9
2200	Methylisothio- cyanat	B	15.9

VI. Auffindung eines UV-Spektrums anhand des stärksten
Maximums

a) Anleitung

Von einer unbekannten Substanz wird in methanolischer Lösung ein UV-Spektrum im Bereich von 220 bis 360 nm aufgenommen, wobei die Konzentration so gewählt wird, daß auch noch schwache Absorptionen festgestellt werden können. Die Lage der Maxima wird durch Bestimmung der Wellenlängen in nm festgelegt. Sodann sucht man aus dem Verzeichnis der UV-Maxima mit steigender Wellenlänge (Seite 129) alle Substanzen heraus, deren stärkstes Maximum etwa mit dem der unbekannten Substanz übereinstimmt. Weitere Hinweise auf das gesuchte Vergleichsspektrum geben die zusätzlichen Maxima. Nun wird das UV-Spektrum der unbekannten Substanz mit den Spektren der in Frage kommenden Substanzen verglichen (Seite 14 bis 91).

Liegt eine Übereinstimmung in der Lage und der relativen Intensität der UV-Maxima zwischen dem Spektrum der unbekannten Substanz und dem der Vergleichssubstanz vor, so kann es sich um die gleiche Substanz handeln. Nur weitere analytische Untersuchungen, wie z.B. der Vergleich der IR-Spektren, können die Identität beider Substanzen beweisen.

b) Verzeichnis

der UV-Maxima mit steigender Wellenlänge

Stärkstes Maximum in nm	Substanz	Weitere Maxima in nm
226	Methoxychlor	241, 269, 280
232	Trichlorphon	272
232	Binapacryl	304
234	DDT	266, 254, 275
234	Tetradifon	246, 286, 295, 277
235	Zineb	266
236	Chlorpropham	277, 284, 270
237	Dimetan	---
238	Chlorbufam	278, 285, 272
240	Metiram	237, 277
240	Methylisothiocyanat	---
245	Metham	281
245	Monolinuron	279
247	Ferbam	---
247	Linuron	286
248	Captan	---
249	Crimidine	277
249	Dithianon	---
249	Diuron	288
250	Toxaphen	---
251	Fenthion	285
251	Ziram	274
255	Sulfotepp	280
257	Tetrasul	278
257	Phenkapton	290, 300
258	Chinothionat	343, 353, 256
260	Rhodandinitrobenzol	283, 321

Stärkstes Maximum in nm	Substanz	Weitere Maxima in nm
260	Nikotin	255, 266
260	Prometryn	---
261	Chlorthion	---
261	Propazin	---
262	Atrazin	---
262	Simazin	---
264	Chlorfenson	267, 257, 275
264	Folithion	---
264	Dinoseb	293
264	DNOC	301
265	Mercaptodimethur	---
268	Endothion	259
269	Parathion-methyl	---
269	Propoxur	276
270	Parathion	---
272	Thiram	247, 238
272	Propham	268, 280
277	Diazinon	257
277	Maneb	---
279	Carbaryl	269, 289, 286
279	Mecoprop	285
279	MCPA	286
279	MCPB	286
281	Gusathion-A	298, 312
281	Warfarin	304, 270, 316, 293
281	ANTU	268
281	Allylalkohol	---
282	Gusathion-M	299, 312
282	Coumachlor	305, 270, 317
282	2,4-D	289

Stärkstes Maximum in nm	Substanz	Weitere Maxima in nm
283	Dazomet	245
284	Dichlorprop	291
285	Pindone	235, 275, 301
286	Diallate	---
288	2,4,5-T	296
288	Fenoprop	296
289	Hexachlorbenzol	299
292	Rotenon	234
294	Dimetilan	---
296	Trichlortrinitrobenzol	---
300	Quintozen	292
301	Pentachlorphenol	322, 250, 295
306	Coumatetralyl	282, 272, 318
308	Deiquat	---

Die folgenden Substanzen wiesen in methanolischer Lösung im Bereich von 220- 360 nm keine UV-Maxima auf:

Aldrin	Disulfoton
Aminotriazol	Dodine
Chlordan	Endosulfan
Cycluron	Endrin
D-D	Heptachlor
Dalapon-Na	Hexachlorcyclohexan
Demeton-S-Methyl	Lindane
Dichlorphos	Malathion
Dieldrin	Pyrethrum
Dimefox	TCA
Dimethoate	Triallate

VII. Alphabetisches Verzeichnis international
gebräuchlicher Namen und Handelsnamen
der untersuchten Wirkstoffe

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
Aadodin	s. Dodine	15.8
Aazira	s. Ziram	9.7
Acrizid	s. Binapacryl	4.1
Afalon	s. Linuron	13.3
<u>Aldrin</u>	HHDN	1.5
<u>Allylalkohol</u>		15.1
Alphanaphthyl- thioharnstoff	s. ANTU	7.1
Alvit	s. Dieldrin	1.6
<u>Aminotriazol</u>		15.2
Animert	s. Tetrasul	1.16
<u>ANTU</u>	Alphanaphthyl- thioharnstoff u.a.	7.1
Aresin	s. Monolinuron	13.4
<u>Atrazin</u>	Gesaprim, Primatol	14.1
Avadex	s. Diallate	12.3
Avadex BW	s. Triallate	12.5
Basudin	s. Diazinon	2.3
Basamid	s. Dazomet	15.5
Baygon	s. Propoxur	3.5
Baytex	s. Fenthion	2.9
Benzolsulfonat	s. Chlorfenson	1.11
Bercema-		
Chlorfenson	s. Chlorfenson	1.11
<u>Binapacryl</u>	Acricid, Morocid	4.1

* nach PERKOW (1971)

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
Bi Pc	s. Chlorbufam	12.1
Bladafum	s. Sulfotepp	2.17
Blattanex	s. Propoxur	3.5
Brassicol	s. Quintozen	10.1
<u>Captan</u>	Orthocid	15.3
<u>Carbaryl</u>	Sevin	3.1
Carbazink	s. Ziram	9.7
Carpene	s. Dodine	15.8
Castrix	s. Crimidine	8.1
<u>Chinothionat</u>	Thioquinex,	
	Eradex	15.4
<u>Chlorbufam</u>	Bi Pc	12.1
<u>Chlordan</u>	Cortilan,	
	Delitia-Werren- präparat,	1.8
	Octachlor	
<u>Chlorfenson</u>	Benzolsulfonat,	
	Bercema-Chlorfenson,	
	Difensan,	1.11
	Ovex,	
	Ovotran,	
	PCPBS	
Chlor-IPC	s. Chlorprophan	12.2
Chlorophen	s. Toxaphen	1.10
<u>Chlorprophan</u>	Chlor-IPC,	
	CIPC,	12.2
	Prevenol	
<u>Chlorthion</u>		2.1
CIPC	s. Chlorprophan	12.2
CMPP	s. Mecoprop	11.7

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
Cortilan	s. Chlordan	1.8
<u>Cumachlor</u>	Cumachlor, Tomörin	5.1
Coumafene	s. Warfarin	5.3
<u>Coumatetralyl</u>	Racumin	5.2
<u>Crimidine</u>	Castrix, Temus W	8.1
Cumachlor	s. Cumachlor	5.1
<u>Cycluron</u>	O M U	13.1
Cyprex	s. Dodine	15.8
<u>2,4-D</u>	zahlreiche Bezeichnungen	11.1
<u>Dalapon - Na</u>	Dowpon	11.2
DATC	s. Diallate	12.3
<u>Dazomet</u>	Basamid DMTT	15.5
	Mylone	
DCMU	s. Divron	13.2
<u>D - D</u>		1.12
<u>DDT</u>	Di Di Tan, Gesarol u.a.	1.1
DDTC	s. Diallate	12.3
DDVP	s. Dichlorphos	2.4
<u>Deiquat</u>	Diquat-Dibromid, Reglone	15.6
Delan	s. Dithianon	15.7
Delitia-Werren- präparat	s. Chlordan	1.8
<u>Demeton-S-Methyl</u>	Metasystox-i, Methyl-Demeton	2.2

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
Derris	s. Rotenon	15.13
<u>Diallate</u>	Avadex, DATC, DDTC	12.13
<u>Diazinon</u>	Basudin, Exodin u.a.	2.3
<u>Dichlorphos</u>	DDVP, Vapona	2.4
<u>Dichlorprop</u>	2,4-DP u.a.	10.3
Di Do Tan	s. DDT	1.1
<u>Dieldrin</u>	Alvit, HEOD u.a.	1.6
Difensan	s. Chlorfenson	1.11
<u>Dimefox</u>	Hanane, Pestox 14	2.5
<u>Dimetan</u>		3.2
<u>Dimethoate</u>	Perfektion, Rogor, Roxion u.a.	2.6
<u>Dimetilan</u>		3.3
<u>Dinoseb</u>	DNBP, Gebutox, Hivertox u.a.	4.2
Dipterex	s. Trichlorphon	2.18
Diquat-Dibromid	s. Deiquat	15.6
<u>Disulfoton</u>	Disyston, Dithiosystox, Thiodemeton	2.7
Disyston	s. Disulfoton	2.7
Dithane M 22	s. Maneb	9.2
Dithane Z 78	s. Zineb	9.6

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
<u>Dithianon</u>	Delan	15.7
Dithiosystox	s. Disulfoton	2.7
<u>Diuron</u>	DCMU, DMU,	13.2
	Karnex	
DMDT	s. Methoxychlor	1.2
DMTT	s. Dazomet	15.5
DMU	s. Diuron	13.2
DNBP	s. Dinoseb	4.2
<u>DNOC</u>	zahlreiche Bezeichnungen	4.3
<u>Dodine</u>	Aadodin, Carpene, Cyprex, Melprex, Questuran	15.8
Dowpon	s. Dalapon-Na	10.2
2,4-DP	s. Dichlorprop	11.3
Dylox	s. Trichlorphon	2.18
E 605	s. Parathion	2.14
Eftol	s. Parathion	2.14
Endocide R	s. Endothion	2.8
<u>Endosulfan</u>	Thiodan	1.13
<u>Endothion</u>	Endocide R	2.8
<u>Endrin</u>	Mendrin	1.7
Eradex	s. Chinothionat	15.4
Exodin	s. Diazinon	2.3
Fenitrothion	s. Folithion	2.10
<u>Fenoprop</u>	Silvex, 2,4,5-TP	11.4
<u>Fenthion</u>	Baytex, Lebaycid, Mercaptophos	2.9

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
<u>Ferbam</u>		9.1
<u>Folithion</u>	Fenitrothion, Sumithion	2.10
Fuclasin Ultra	s. Ziram	9.7
Gamma BHC	s. Lindane	1.4
Gammexan	s. Lindane	1.4
Gebutox	s. Prometryn	14.2
Gesaprim	s. Atrazin	14.1
Gesarol	s. DDT	1.1
Gesatop	s. Simazin	14.4
<u>Gusathion-A</u>		2.11
<u>Gusathion-M</u>		2.12
Hanane	s. Dimefox	2.5
HCB	s. Hexachlorbenzol	1.14
HCH	s. Lindane	1.4
<u>Heptachlor</u>		1.9
HEOD	s. Dieldrin	1.6
<u>Hexachlorbenzol</u>	HCB u.a.	1.14
<u>Hexachlorcyclohexan</u>		1.3
HHDN	s. Aldrin	1.5
Hivertox	s. Dinoseb	4.2
IPC	s. Protham	12.4
Karmex	s. Diuron	13.2
Lebaycid	s. Fenthion	2.9
<u>Lindane</u>	gamma BHC, HCH, Gammexan, u.a.	1.4
<u>Linuron</u>	Afalon, Lorox	13.3
Lorox	s. Linuron	13.3
<u>Malathion</u>		2.13

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
<u>Maneb</u>	Dithane M 22, Manzate, u.a.	9.2
Manzate	s. Maneb	9.2
MCP	s. MCPA	11.5
<u>MCPA</u>	MCP, zahlreiche Bezeichnungen	11.5
<u>MCPB</u>	MCPB-Fluid, U 46	11.6
MCPP	s. Mecoprop	11.7
ME 605	s. Parathion-Methyl	2.15
<u>Mecoprop</u>	CMPP, MCPP, zahlr. Bezeichnungen	11.7
Melprex	s. Dodine	15.8
Mendrin	s. Endrin	1.7
<u>Mercapto- dimethur</u>	MesuroI, Metmercapturon	3.4
Mercaptophos	s. Fenthion	2.9
Metasystox-i	s. Demeton-S-Methyl	2.2
<u>Metham</u>	Vapam	9.3
<u>Methoxychlor</u>	DMDT, u.a.	1.2
Methyl-Demeton	s. Demethon-S-Methyl	2.2
<u>Methylisothio- cyanat</u>		15.9
Methyl-Parathion	s. Parathion-Methyl	2.15
MesuroI	s. Mercaptodimethur	3.4
<u>Metiram</u>	Polyram-Combi	9.4
Metmercapturon	s. Mercaptodimethur	3.4
<u>Monolinuron</u>	Aresin	13.4
Morocid	s. Binapacryl	4.1
Mylone	s. Dazomet	15.5

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
α -Naphthyl-		
thioharnstoff	s. ANTU	7.1
NaTa	s. TCA	11.9
<u>Nikotin</u>	zahlreiche Bezeichnungen	15.10
Octachlor	s. Chlordan	1.8
Octachlorophen	s. Toxaphen	1.10
OMU	s. Cycluron	13.1
Orthocid	s. Captan	15.3
Ovex	s. Chlorfenson	1.11
Ovotran	s. Chlorfenson	1.11
<u>Parathion</u>	E 605, Eftol, POX, Thiophos, Vitrex	2.14
<u>Parathion-Methyl</u>	ME 605, Methyl-Parathion, u.a.	2.15
PCNB	s. Quintozen	10.1
PCPBS	s. Chlorfenson	1.11
<u>Pentachlorphenol</u>		15.11
Perfektion	s. Dimethoate	2.6
Pestox 14	s. Dimefox	2.5
<u>Phenkapton</u>		2.16
<u>Pindone</u>	Pival, Pivaldione, Pivalyn	6.1
Pivaldione	s. Pindone	6.1
Pivalyn	s. Pindone	6.1

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
Polychlorcaphen	s. Toxaphen	1.10
Polyram-Combi	s. Metiram	9.4
POX	s. Parathion	2.14
Prevenol	s. Chlorpropham	12.2
Primatol	s. Atrazin	14.1
Primatol S	s. Simazin	14.4
<u>Prometryn</u>	Gesagard	14.2
<u>Propazin</u>	Vorox i	14.3
<u>Propham</u>	PC, u.a.	12.4
<u>Propoxur</u>	Baygon, Blattanex, Unden	3.5
Pyrethrine	s. Pyrethrum	15.12
<u>Pyrethrum</u>	Pyrethrine	15.12
Quasturan	s. Dodine	15.8
<u>Quintozen</u>	Brassicol, PCNB, Terrachlor, Tritisan	10.1
Racumin	s. Coumatetralyl	5.2
RDNB	s. Rhodandinitro- benzol	10.2
Reglone	s. Deiquat	15.6
<u>Rhodandinotrobenzol</u>	RDNB	10.2
Regor	s. Dimethoate	2.6
<u>Rotenon</u>	Derris	15.13
Roxion	s. Dimethoate	2.6
Sevin	s. Carbaryl	3.1
Silvex	s. Fenoprop	11.4

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
<u>Simazin</u>	Gesatop,	
	Primatol S	14.4
SNIP	s. Dimetilan	3.3
<u>Sulfotepp</u>	Bladafum,	
	TEDP	2.17
Sumithion	s. Folithion	2.10
<u>2,4,5-T</u>	zahlreiche	
	Bezeichnungen	11.8
<u>TCA</u>	NaTa	11.9
TCTNB	s. Trichlortrinitro-	
	benzol	10.3
Tedion V 18	s. Tetradifon	1.15
TEDP	s. Sulfotepp	2.17
Temus W	s. Crimidine	8.1
Terrachlor	s. Quintozen	10.1
<u>Tetradifon</u>	Tedion V 18	1.15
<u>Tetrasul</u>	Animert	1.16
Thiodan	s. Endosulfan	1.13
Thiodemeton	s. Disulfoton	2.7
Thiphos	s. Parathion	2.14
Thioquinex	s. Chinothionat	15.4
<u>Thiram</u>	TMTD, u.a.	9.5
TMTD	s. Thiram	9.5
Tomorin	s. Coumachlor	5.1
<u>Toxaphen</u>	Chlorophen,	
	Octachlorophen,	1.10
	Polychlorcamphen	
2,4,5-TP	s. Fenoprop	11.4
<u>Triallate</u>	Avadex BW	12.5

Name	sonstige Namen	Spektrum Nr.
<u>Trichlorphon</u>	Dipterex, Dylox, Tugon	2.18
<u>Trichlortrinitro-</u> <u>benzol</u>	TCTNB	10.3
Tritisan	s. Quintozen	10.1
Tugon	s. Trichlorphon	2.18
U 46 MCPB-Fluid	s. MCPB	11.6
Unden	s. Propoxur	3.5
Vapam	s. Metham	9.3
Vapona	s. Dichlorphos	2.4
Vitrex	s. Parathion	2.14
Vorox i	s. Propazin	14.3
<u>Warfarin</u>	Coumafene, u.a.	5.3
<u>Zineb</u>	Dithane Z 78, u.a.	9.6
<u>Ziram</u>	Aazira, Carbazink, Fuclasin, Ultra	9.7

C DISKUSSION

Zu den Schädlingsbekämpfungsmitteln im engeren Sinne zählen Mittel zur Bekämpfung von pflanzenschädigenden Insekten, Milben, Nematoden und Pilzerkrankungen (Insektizide, Akarizide, Nematizide, Fungizide). Aber auch Mittel gegen Unkräuter, Nagetiere und Schnecken (Herbizide, Rodentizide, Molluskizide) werden in der Praxis dem Pflanzenschutz zugerechnet, ferner Keimhemmungsmittel, Mittel zur Verhütung von Wildschäden und Krähenfraß, zur Kraut- und Blattabtötung und zur Beeinflussung des Pflanzenwuchses.

Zur Schädlingsbekämpfung gehören ferner der Hygienesektor, d.h. die Bekämpfung des Ungeziefers, das den Menschen unmittelbar schädigt oder belästigt, und der sogenannte Materialschutz (z.B. Holzschutz).

Viele dieser Wirkstoffe führen beim Menschen zu Vergiftungen. So wurden in den letzten Jahren zahlreiche, empfindliche Verfahren zum Nachweis der Schädlingsbekämpfungsmittel entwickelt.

Neben den chromatographischen Methoden (Dünnschicht-, Papier- und Gaschromatographie) und der Absorptionsspektrographie im sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich besitzt die Infrarotspektroskopie als spezifisches Verfahren in der forensischen und klinischen Toxikologie große Bedeutung. Mit Hilfe der Infrarotspektroskopie können bei geringem Substanzbedarf die vielseitigsten Aussagen gemacht werden, da ein Wirkstoff meist eine große Zahl von Banden liefert, deren Lage und Intensitäten sehr charakteristisch für die jeweilige Verbindung ist. Haben zwei Substanzen

das gleiche Infrarotspektrum, so kann behauptet werden, daß die beiden Substanzen mit sehr großer Wahrscheinlichkeit identisch sind.

Das Studium der Literatur ergab, daß bisher eine Zusammenstellung der Infrarot- und Ultraviolettpektren für die Pflanzen- und Schädlingsbekämpfungsmittel nicht vorliegt. Lediglich von GORE et. al. (1971) wurden 76 Infrarotspektren aufgenommen. Bei den veröffentlichten Spektren fehlen jedoch Zahlenangaben über Lage der Infrarot-Banden bzw. der Maxima in den Ultraviolettpektren.

Aufgabe dieser Arbeit war es, von den im Handel befindlichen Wirkstoffen der Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel die Infrarot- und Ultraviolettpektren aufzunehmen und einen geeigneten Schlüssel zur Dokumentation der Spektren auszuarbeiten.

Die Wirkstoffe wurden nach KLIMMER (1964) in 15 Gruppen eingeteilt. Die Bezeichnung der Wirkstoffe erfolgte entsprechend den Empfehlungen der ISO (International Organization for Standardization) und der BSI (British Standards Institution).

Die gebräuchlichsten Synonyma sind in einer Tabelle (s.S. 132) zusammengefaßt.

Von den einzelnen Wirkstoffen wurden die Infrarot- und Ultraviolettpektren unter den auf S. 12-13 beschriebenen Standardbedingungen aufgenommen.

Nach eingehender Prüfung der verschiedenen in der Literatur beschriebenen Dokumentationsschlüssel wurde die Methode von CURRY (1963) gewählt. Im IR-Spektrum einer Substanz werden die drei stärksten Banden markiert und nach fallender Intensität mit A, B, und C geordnet. Banden gleicher Intensität erhielten den gleichen Buchstaben. Die markierten Absorptionsbanden wurden in Tabellen zusammengefaßt (s.S. 92 und 117). Das Vorgehen zum Auffinden einer unbekannten

Substanz wurde auf S. 114 beschrieben.

Nach dem gleichen Prinzip wurden die Ultravioletspektren ausgewertet.

D ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wurden von 93 Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln die Infrarot- und Ultraviolettspektren aufgenommen. Über einen brauchbaren Schlüssel zur Dokumentation der Infrarot- und Ultraviolettspektren wurde berichtet.

E LITERATURVERZEICHNIS

CLARKE, E.G.C.

Isolation and identification of drugs
Pharmaceutical Press London (1969)

CURRY, A.S

The coding of analytical data.
Third international Meeting in forensic immunology,
medicine, pathology and toxicology.
London, April 1963

GORE, R.C. et al

Infrared and Ultraviolet Spectra of Seventy- six
Pesticides.
J. of the AOAC (54, 1971)

KLIMMER, O.R.

Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmittel
Verlag Hundt, Hattingen (1964)

KUNZ, G.

Entwicklung eines Schlüssels zur Dokumentation von
Vergiftungsfällen auf Hollerith-Lochkarten;
Kasuistik unter Berücksichtigung der klinischen
Symptome und der Sektionsbefunde.
Diss. Tübingen (1970)

MACHATA, G.

Der Computer in der gerichtlichen Medizin bzw. in
der gerichtlichen Chemie.
In: Computer in der Medizin,
herausgegeben von K. FELLINGER,
Verlag Brüder Hollinek, Wien (1968)

MÜLLER, R.K.

Randlochkartendokumentation der Literatur über
toxikologisch-chemische Analytik.

Arch. Toxikol. 22, 283 (1967)

PERKOW, W.

Wirksubstanzen der Pflanzenschutz- und Schädlings-
bekämpfungsmittel.

Paul Parey, Berlin und Hamburg (1971)

PETSCHLER, H.-D.

Dokumentation von UV-Spektren mit Hilfe von Kerbloch-
karten in der forensisch-toxikologischen Analytik.

Diss. Erlangen (1971)

POST, D.

Die Dokumentation im toxikologischen Laboratorium.
Praktische Substanzidentifizierung mit Hilfe von
Sichtlochkarten.

Beitr. gerichtl. Med. 26, 202 (1969)

POST, D.

Möglichkeiten und Probleme der Substanzdokumentation
in der analytischen Toxikologie (mit speziellen
Erfahrungen einer Sichtlochkartei).

Arch. Toxikol. 25, 32 (1969)

Sadtler Catalog of Infrared Spectrograms,
Philadelphia 2, Pa.

Infrared Spectra of Pharmaceuticals.

Heyden & Son Ltd, London, ohne Jahresangabe

SCHMIDT, Gg.

Dokumentationsschlüssel für die forensische Toxikologie.

Beitr. gerichtl. Med. 26, 198 (1969)

An dieser Stelle bedanke ich mich bei Herrn
Professor Dr. Dr. E. Weinig für die Über-
lassung des Themas und für die Bereitstellung
eines Arbeitsplatzes in seinem Institut

Herrn Dr. G. Machbert gilt mein besonderer
Dank für seine vielfältigen und wertvollen
Anregungen bei der Anfertigung dieser Arbeit.

Für die Überlassung der Reinsubstanzen danke
ich den Firmen:

Merck AG., Darmstadt
BASF AG., Ludwigshafen
Bayer, Leverkusen
Geigy AG., Basel
Schering AG., Berlin
Farbwerke Hoechst AG., Frankfurt
Chem. Fabrik Delitia, Delitzsch
Riedel-DE HAEN AG., Seelze-Hannover
Gebr. Borchers AG., Goslar

Lebenslauf

Am 24.8.1938 wurde ich, Peter Doepner, als Sohn des Arztes Dr. med. Fritz Doepner und seiner Ehefrau Ruth, geborene Bertram, in Berlin geboren.

Gegen Ende des Krieges zog meine Mutter nach Kemmerring im Landkreis Altötting in Oberbayern. Hier wurde ich eingeschult.

Ab 1948 besuchte ich das Realgymnasium in Pocking. 1950 siedelten meine Eltern nach Bad Ems im Rheinland um, wo ich das Goethe-Gymnasium besuchte. Ab 1952 war ich zum Zwecke der Erlernung der französischen Sprache Schüler am College Marceau in Koblenz. 1954 ging ich auf Anraten meines Vaters nach Kanada und beendete am Luther College in Regina in der Provinz Saskatchewan die High School. Im Herbst des Jahres 1958 begann ich an der Universität von Saskatchewan in Saskatoon zu studieren.

Seit 1961 studierte ich an der Universität von Erlangen-Nürnberg, Medizin. Im Frühjahr 1970 beendete ich das medizinische Staatsexamen in Erlangen. Bis zum Frühjahr 1971 war ich als Medizinalassistent in Brake an der Unterweser tätig.

Zur Zeit befinde ich mich in der Ausbildung zum Hals-Nasen-Ohrenarzt in Bremerhaven.

Offsetdruck-Fotodruck

J. Hogl, 8520 Erlangen, Hauptstr. 109 (Nähe Martin-Luther-Platz) Tel. 22990